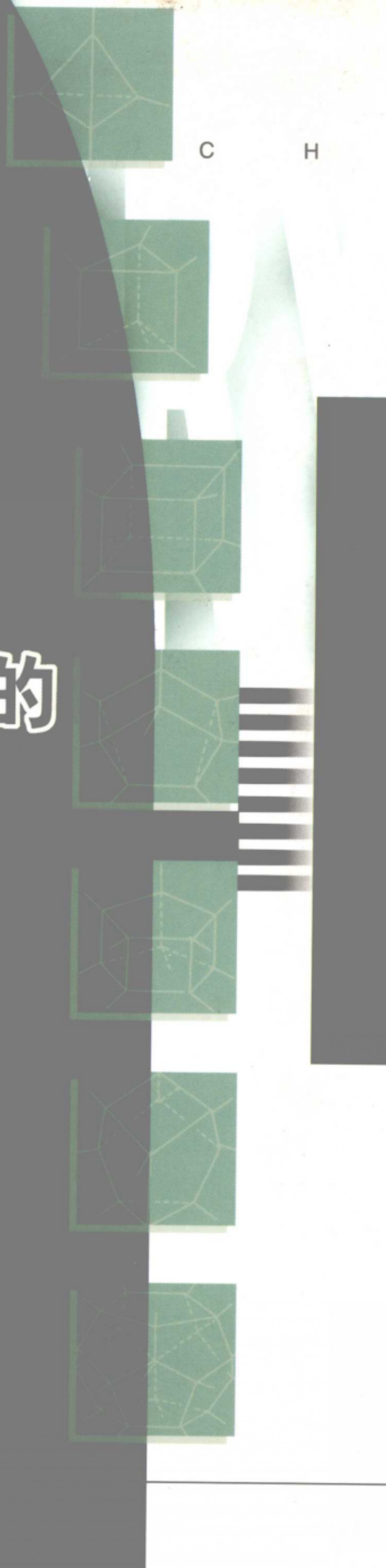


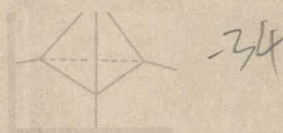
唐敖庆

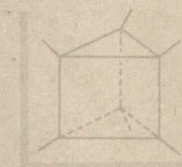
理论化学中的群论方法

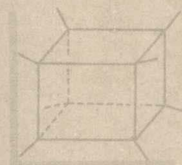


理论化学中的群论方法


ISBN 7-5601-3017-8
9 787560 130170 >

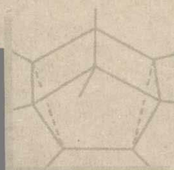


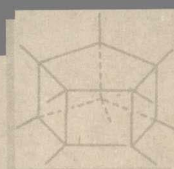




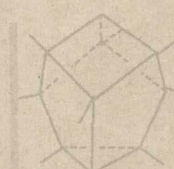
唐敖庆

理论化学中的群论方法





（李伯符 郭纯孝 整理）





图书在版编目（CIP）数据

理论化学中的群论方法/名唐敖庆编著．一长春：吉林大学出版社，2003．9
ISBN 7—5601—3017—8

Ⅰ．理… Ⅱ．唐… Ⅲ．群论—应用—物理化学
Ⅳ．064

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2003）第 007420 号

理论化学中的群论方法
唐 敖 庆

责任编辑、责任校对：赵洪波　　封面设计：孙　群

吉林大学出版社出版
（长春市明德路 3 号）
吉林大学出版社发行
吉林农业大学印刷厂印刷

开本：787×1092 毫米 1/16
印张：41.25
字数：953 千字
2003 年 9 月第 1 版
2003 年 9 月第 1 次印刷
印数：1—500 册

ISBN 7—5601—3017—8/O·283　　定价：88.00 元

序

1999年由吉林大学郭纯孝教授建议总结、整理、出版唐敖庆院士教学成果。经吉林大学党委研究成立了“总结唐敖庆教授教学思想并出版讲课文稿”研究组。由吉林大学理论化学计算国家重点实验室承担这项工作，并先后得到教育部高教司和国家自然科学基金委员会的支持。

1963年原高教部委托唐敖庆院士在吉林大学举办“物质结构讨论班”，为期三年。唐敖庆院士在讨论班上，根据国内理论化学科研和教学的需要，系统地讲述了有关群论的理论方法和应用。经过研究组讨论，认为总结、整理唐敖庆院士在这方面的教学成果有重要的意义。由李伯符教授承担这项工作，郭纯孝教授辅助做这项工作。

福州物质结构研究所刘春万教授和吉林大学裘祖文教授提供了当年唐敖庆院士讲课时所记的笔记。经过研究，认为重点选择唐敖庆院士讲课若干主要内容加以整理可能是适当的（例如，有关置换群和连续群的特征标方面涉及的很少），为了适当地反映唐敖庆院士所领导的科研集体在群论应用方面的某些研究成果，在分子的不可约张量方法方面有所补充。本书的初稿先后送给鄢国森教授、刘春万教授、李前树教授、吴兆颜教授、朱诚久教授和于微舟教授进行审阅，在听取了这些专家的意见后又经过三次修改，最后定稿为“理论化学中的群论方法”。唐敖庆院士由于健康原因没有对本书稿进行过审阅。因此，书中难免有疏漏、缺点，甚至错误，恳请读者提出宝贵意见。

向审阅本书初稿的各位专家表示衷心的感谢，也向教育部高教司、国家自然科学基金委员会的支持表示衷心的感谢。

孙家钟

2003年9月

目 录

第一章　有限群理论基础

在这一章中首先讨论有限群理论中的基本概念，以及相关的定理；而后重点讨论有限群表示问题，以及特征标，给出并证明一些重要定理，为以后各章中群的专题研究提供必要的准备．这一章的内容是学习群论的必要的基础，是进入群论这一数学领域的必由之路．深刻地理解群，特别是群的表示理论，需要一定的线性代数基础知识，读者必要时可补习一下线性代数的基础知识．

1.1　群

在本节中将讨论群的定义，以及相关的定理．群(group)是数学中的一个重要概念，它描述内部存在特定联系的元素集合，集合内的元素在数学上是抽象的，但在物理或化学以及其它学科的应用中，这些元素将具有特定的物理意义和几何意义．

定义 1.1.1　令 $G=\{g_1, g_2,\cdots,g_N\}$ 是一元素集合，g_1，g_2，$\cdots$，g_N 是集合 G 中的元素，在这些元素之间定义一种运算，通常称为乘法．如果集合 G 中的元素在这种运算下，满足如下 4 个条件，则称集合 G 为一个群．这 4 个条件是：

（1）如果取集合 G 中任意两个元素 g_i，g_k，它们的乘积 $g_i\cdot g_k=g_l$，g_l 一定也是集合 G 中的一个元素，即：若 g_i，$g_k\in G$，则 $g_i\cdot g_k=g_l\in G$．这一性质称为封闭性

（2）对于集合 G 中的任意元素 g_i，g_k，g_l，存在关系：

$$(g_i\cdot g_k)\cdot g_l = g_i\cdot(g_k\cdot g_l)$$

即集合内元素在所定义的运算下，遵循结合律．（这也是群内元素间的运算称为乘法的原因，因为所有的乘法都遵循结合律）．

（3）集合 G 中存在一个而且只存在一个元素 g_0，使得对集合内任意元素 g_i 存在关系

$$g_0\cdot g_i = g_i\cdot g_0 = g_i$$

称这个唯一的元素 g_0 为单位元，一般记为 e．

（4）集合中每个元素 g_i 都存在一个元素 g_i^{-1}，使得

$$g_i\cdot g_i^{-1} = g_i^{-1}\cdot g_i = e$$

称 g_i 与 g_i^{-1} 互为逆元素．

下面举几个简例来说明群的定义．

例 1　全部实数在加法下构成一个群．

实数相加仍然为实数，因而它满足封闭性；加法运算满足结合律，0 为单位元，实数 $(-x)$ 与 x 互为逆元素．

例 2　除去 0 之外的全部实数在乘法下构成一个群．

这个群也是显然的，实数相乘还是实数，满足封闭性；实数乘法符合结合律；1 为单

位元；实数 x 与实数 $1/x$ 互为逆元素. 但是实数 0 与任意实数相乘都不可能为 1，因而 0 没有逆元素存在，所以包括 0 在内的全部实数在乘法下不构成群.

例 3 二维旋转群 R_2.

在三维空间中取任一矢量 $\boldsymbol{R}$，绕 $\boldsymbol{R}$ 的所有转动构成一个群，称为二维旋转群，通常记为 R_2. 绕 $\boldsymbol{R}$ 转动 θ 角，为群 R_2 中的一个元素，记为 $R(\theta)$，两个旋转 $R(\theta_1)$ 和 $R(\theta_2)$ 之间的乘法定义为转动 $R(\theta_1+\theta_2)$，即

$$R(\theta_1)\cdot R(\theta_2)=R(\theta_1+\theta_2)$$

显然这种转动是封闭的，而且遵守结合律，$R(0)=R(2n\pi)$ 为单位元，$R(\theta)$ 与 $R(-\theta)$ 互为逆元素.

定义 1.1.2 设 H 是群 G 的一个子集，若对于群 G 定义的乘法运算，H 也构成一个群，则称 H 为 G 的子群(subgroup)，记为 $H\subset G$.

群 G 的子集 H 构成子群的条件是：若 g_i，$g_j\in H$，则 $g_i\cdot g_j\in H$，若 $g_i\in H$，则 $g_i^{-1}\in H$，H 包括单位元 e.

对于任何群 G，单位元 e 本身为 G 的子群，G 也可认为是 G 本身的子群. 但是这两个子群并没有实质上的意义，一般称为平庸子群或显然子群. 群 G 除了上述平庸子群外的真正子群称为真子群或固有子群.

例 4 前面例 1 所给出的实数群中，取全部整数，它们在加法运算下，仍然为一个群，因而全部整数所构成的加法群为全部实数所构成的加法群的子群.

例 5 C_3 群，保持平面上正三角形不变只有一个轴的转动构成的对称群称为 C_3 群. 它包括绕垂直正三角形平面并通过正三角形中心的轴转 $2\pi/3$，$4\pi/3$ 和 $6\pi/3=2\pi$ 的三个转动，转动 2π 的转动为单位元素. 显然它是 R_2 群的子群.

从前面的例子可看到一个群可包括子群，群的元素可以是连续的无穷多个，如实数群；也可以是分立的无穷多个，如整数群；也可以是有限个，如 C_3 群. 由有限个元素构成的群称为有限群. 有限群所包括的元素数目称为群的阶数.

对于有限群，一般要构造出它们的乘法表，用这种表来描述它们乘法运算的关系. 如 C_3 群只有 3 个元素，即 e，$R(2\pi/3)$，$R(4\pi/3)$，下面列出了它的乘法表：

C_3 的乘法表

R_3	e	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$
e	e	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$
$R(2\pi/3)$	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$	e
$R(4\pi/3)$	$R(4\pi/3)$	e	$R(2\pi/3)$

为了构造和描述群的乘法，有一个重要定理，即重排定理.

定理 1.1.1(重排定理) 令 $G(g_1,g_2,\cdots,g_N)$ 为一个群. 取其中的一个特定元素 $g_k\in G$，它与 G 中任一元素 g_α 之乘积，$g_k\cdot g_\alpha=g_l$ 仍然为 G 中的一个元素，当 α 取遍整个群时，l 也取遍整个群，而且对给定的 g_α，g_l 只出现一次.

证明 首先证明 G 中的任何元素 g_α 都可写为群中一个元素 g_β 与另一个元素 g_γ 之积，即 $g_\alpha=g_\beta\cdot g_\gamma$. 为了证明 g_γ 为群 G 中的元素，只须用 g_β 之逆 g_β^{-1} 乘上前式得到

$$g_\beta^{-1} \cdot g_\alpha = g_\beta^{-1} \cdot g_\beta \cdot g_\gamma = g_\gamma$$

进一步再证明对给定元素 g_α 和 g_β，g_γ 是唯一的，比如还存在元素 $g_{\gamma'}$ 与 g_β 之积也是 g_α，即 $g_\beta \cdot g_\gamma = g_\beta \cdot g_{\gamma'}$. 此时用 g_β^{-1} 乘上式得到 $g_\beta^{-1} \cdot g_\beta \cdot g_\gamma = g_\beta^{-1} \cdot g_\beta \cdot g_\gamma$，于是 $g_\gamma = g_{\gamma'}$，而对一定的元素 g_β，当 g_γ 取不同元素时，就得到了不同的 g_α. 最后就可得到当 g_γ 取遍整个群时，就对一定的 g_β 得到了群的全部元素 g_α，而且每个 g_α 只出现一次. 这就证明了这个定理.

重排定理告诉我们，对有限群可构造一个乘法表，即把 N 个群元素按一定次序排成一行，按相同次序再排成一列，把第 i 行与第 j 列的元素 g_i 和 g_j 之积 $g_i \cdot g_j$ 列入第 i 行与第 j 列交叉之处，于是全部乘法结果就构成了一个 N 行 N 列的乘法表. 在这个表中每一行或每一列都是 N 个群元素的不同排列.

例 6　D_3 群的乘法表.

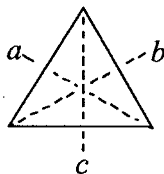
D_3 群是由保持平面上正三角形不变的转动群，它有六个元素，分别为（如下图所示）

e（单位元）：不变；

d：绕垂直正三角形平面并通过三角形重心的轴转 $2\pi/3$ 角度；

f：绕上述轴转 $4\pi/3$；

a，b，c 分别为绕正三角形三个分角线转 π 角的转动.



下面列出了这六个变换操作的乘法表.

D_3 的乘法表

D_3	e	d	f	a	b	c
e	e	d	f	a	b	c
d	d	f	e	c	a	b
f	f	e	d	b	c	a
a	a	b	c	e	d	f
b	b	c	a	f	e	d
c	c	a	b	d	f	e

利用子群可定义群的左陪集和右陪集，陪集（cost）在群论中有着重要的作用.

定义 1.1.3　令 H 是群 G 的子群 $H = \{h_1, h_2, \cdots, h_k\}$，取 G 中一个不属于子群 H 的元素 g，即 $g \in G$，$g \notin H$. 按群的乘法，可由 g 和子群构造出一个元素集合，即

$$gH = \{g \cdot h_1, g \cdot h_2, \cdots, g \cdot h_k\}$$

由于 g 是从左边乘 H，称这个集合为子群 H 的左陪集，同样也可构造出元素集合.

$$Hg = \{h_1 \cdot g, h_2 \cdot g, \cdots, h_k \cdot g\}$$

称 Hg 为子群 H 的右陪集. 由于 $g \in G$，$h_1, \cdots, h_k \in G$，因而陪集中均为群 G 的元素，而 $g \notin H$，$h_1, \cdots, h_k \in H$，因而陪集中的元素均不在子群 H 之中，否则将破坏子群的封闭性. 陪集中元素的数目等于子群 H 内元素的数目，也就是说陪集中元素的数目等于子群的阶数.

定理 1.1.2（陪集定理）　令 H 为 G 的子群，则子群 H 的两个左陪集或者具有完全相同的元素，或者没有任何相同的元素，对右陪集亦然.

证明　令 g_α, $g_\beta \in G$, 但 g_α, $g_\beta \notin H$, 它们分别构造出两个左陪集，即

$$g_\alpha H = \{g_\alpha \cdot h_1, g_\alpha \cdot h_2, \cdots, g_\alpha \cdot h_k\} \equiv \{g_\alpha \cdot h_i \mid h_i \in H\}$$

$$g_\beta H = \{g_\beta \cdot h_1, g_\beta \cdot h_2, \cdots, g_\beta \cdot h_k\} \equiv \{g_\beta \cdot h_i \mid h_i \in H\}$$

假定它们之间有一个公共元素，即

$$g_\alpha \cdot h_i = g_\beta \cdot h_k$$

用 g_α 的逆 g_α^{-1}，从左边乘上式，得到

$$g_\alpha^{-1} \cdot g_\alpha \cdot h_i = h_i = g_\alpha^{-1} \cdot g_\beta \cdot h_k$$

再用 h_k 的逆 h_k^{-1} 从右边乘上式得到

$$h_i \cdot h_k^{-1} = g_\alpha^{-1} \cdot g_\beta$$

根据群的封闭性，$h_i \cdot h_k^{-1} \in H$. 因而集合

$$\{g_\alpha^{-1} \cdot g_\beta \cdot h_\gamma\} = \{h_i \cdot h_k^{-1} \cdot h_\gamma\}$$

当 γ 取遍子群 H 中的元素时，根据重排定理，$h_i \cdot h_k^{-1} \cdot h_\gamma$ 取遍整个子群 H，而且每元素只出现一次. 于是左陪集

$$g_\alpha H = \{g_\alpha \cdot g_\alpha^{-1} \cdot g_\beta \cdot h_\gamma \mid h_\gamma \in H\} = \{g_\beta \cdot h_\gamma \mid h_\gamma \in H\}$$

与左陪集

$$g_\beta H = \{g_\beta \cdot h_r \mid h_\gamma \in H\}$$

有完全相同的元素. 从而证明了如果两个陪集 $g_\alpha H$ 和 $g_\beta H$ 若有一个相同的元素，则它们的元素全部相同，或者它们间根本没有相同的元素.

这个定理给出了一种利用子群把群的元素分解为互不相交的若干元素集合的方法.

定理 1.1.3(拉格郎日定理)　有限群的子群的阶数等于该有限群阶数的因子.

证明　令 G 是 n 阶有限群，H 是 G 的 m 阶子群. 取 $g_2, g_3, \cdots, g_k \in G$ 而不属于子群 H，构造出一系列左陪集.

$$H = eH, g_2H, g_3H, \cdots, g_kH$$

这些陪集覆盖了整个群 G. 根据陪集定理，这一系列陪集或者完全不相交，或者完全重合，完全重合的陪集只保留一个. 于是各陪集中的元素互不相同，这些完全不相交的陪集系列(包括子群 H,它可视为陪集 eH)覆盖了群 G 的元素. 而每个陪集包括 m 个元素，因而 n/m 等于 k，k 为完全不相交的陪集的数目，即 m 为 n 因子. 即群 G 的阶 n 等于子群 H 的阶 m 乘以完全不相交的陪集数目 k.

由拉格郎日定理可得到一个推论，即如果有限群的阶是素数，它只包括一个因子 1 和它自身. 即素数 $=1 \cdot$ 素数. 因而阶为素数的群只有两个平庸子群，即只由单位元 e 构成的一阶子群和它自身.

注意 n 阶的群 G 按它的 m 阶子群 H 分解为右陪集(或左陪集)之和，即

$$G = H \oplus g_2 \cdot H \oplus g_3 \cdot H \oplus \cdots \oplus g_k \cdot H$$

时 $g_2, g_2 \cdots g_k$ 称为陪集的代表元素，$k = n/m$. 陪集的代表元素是可以不同选择的，但对一定的陪集分解，它们是完全确定的.

例 7　D_3 群. 它的阶为 6，因式分解为 $6 = 2 \cdot 3 = 1 \cdot 6$，表明除平庸子群外，它包括 2 阶子群和 3 阶子群. 绕通过正三角形中心而且垂直正三角形所在平面转动 0，$2\pi/3$，

$4\pi/3$ 的三个转动构成 C_3 群，它是 D_3 群的三维子群；分别绕三个角平分线转 0，π 的三个子群 C_2 是 D_3 的二阶子群.

由子群 H 构成的左陪集

$$gH = \{g \cdot h_i \mid h_i \in H\}$$

与右陪集

$$Hg = \{h_i \cdot g \mid h_i \in H\}$$

一般是不相同的(因为群的乘法一般是不符合交换律的，即 $g_i \cdot g_j \neq g_j \cdot g_i$). 如果对任一元素 $g \in G$ 子群的左陪集 gH 与右陪集 Hg 都完全相同，即

$$g \cdot H = H \cdot g$$

则称子群 H 为不变子群(invariant subgroup)或正则子群(regule subgroup).

如 m 阶群 H 是 n 阶群 G 的不变子群，由 H 构成的左陪集与右陪集相同，可不加分别称为陪集. 互不相交的陪集(包括子群 $H=eH$)共有$\frac{n}{m}$个. 这 n/m 个元素集合可视为新的元素，它们也构成一个群，称为 G 的商群，记为 G/H. 商群 G/H 的元素为

$$eH,\ g_2H,\ g_3H,\ \cdots,\ g_kH \quad (k = n/m)$$

商群的元素为 G 群的元素集合，它的乘法由群 G 的乘法决定，可得到如下规则:

(1) $H \cdot H = \{h_1, h_2, \cdots, h_m\} \cdot \{h_1, h_2, \cdots, h_m\}$
$= \{\cdots h_i \cdot h_j \cdots\} = \{\cdots, h_l, \cdots\} = H$

(2) $g_\alpha \cdot H \cdot g_\beta \cdot H = g_\alpha \cdot g_\beta \cdot H \cdot H = g_\alpha \cdot g_\beta \cdot H = g_l \cdot H$

在得到上式时，利用了 H 为不变子群，因 $H \cdot g_\beta = g_\beta \cdot H$ 的性质.

因为陪集的代表元素 $g_2, g_3, \cdots, g_k$ 是完全选定的，因而 $g_\alpha \cdot g_\beta$ 可能有两种情况，一是 $g_\alpha \cdot g_\beta = g_\gamma$，$g_\gamma$ 为代表元素 $e, g_2, g_3, \cdots, g_k$ 中的一个，因而陪集之积为

$$g_\alpha \cdot H \cdot g_\beta \cdot H = g_\gamma \cdot H, \quad g_\gamma = g_\alpha \cdot g_\beta$$

另一种情况是 $g_\alpha \cdot g_\beta$ 并不是陪集代表元素，但是 $g_\alpha \cdot g_\beta \cdot H = g_\gamma H$ 仍然是一个陪集，根据陪集定理，这个陪集一定是 $e, g_2, g_3, \cdots, g_k$ 为代表元素的一个陪集，比如为 $g_\gamma \cdot H$，因而它就是那个陪集，即

$$g_\alpha \cdot H \cdot g_\beta \cdot H = g_\gamma \cdot H$$

其中 $g_\gamma \neq g_\alpha \cdot g_\beta$，而且 $g_\alpha \cdot g_\beta = g_\gamma \cdot h_i$.

$$g_\alpha H \cdot g_\beta H = \{g_\alpha \cdot h_i \cdot g_\beta \cdot h_k\} = \{g_\gamma \cdot h_j\} = g_\gamma H$$

显然商群的单位元为不变子群 H，$g_\alpha H$ 的逆为 $g_\alpha^{-1}H$，由群 G 乘法遵循结合律可得到商群的乘法也遵循结合律，显然在这种乘法下商群是封闭的. 下面给出商群的定义.

定义 1.1.4　设 m 阶群 H 是 n 阶群 G 的不变子群，互不相交的陪集 $H, g_2H, \cdots, g_kH$ 覆盖了整个群 $G(k=n/m)$，可把元素集合 $H, g_2H, \cdots, g_kH$ 看成是新的群元素，定义这些元素集合的乘法为陪集集合中元素按群的乘法相乘而得到的另一个集合，即

$$H \cdot H = H$$

$$g_\alpha \cdot H \cdot g_\beta \cdot H = g_\gamma \cdot H$$

这在种乘法之下，n/m 个元素集合构成一个群，称为群 G 的商群(factor group)，记为 G/H.

例 8 群 D_3 的商群.

D_3 的 6 个元素为

$$e,\quad d = C_3(2\pi/3),\quad f = C_3^2(4\pi/3)$$

$$a = C_1(\pi),\quad b = C_2(\pi),\quad c = C_3(\pi)$$

它包括 4 个子群：

$$H_1 = \{e, a\},\quad H_2 = \{e, b\},\quad H_3 = \{e, c\},\quad H_4 = \{e, d, f\} = C_3$$

其中 H_4 是不变子群. 它的陪集为

$$aH_4 = \{a, b, c\}$$

因而 $\{C_3, aC_3\}$ 构成 D_3 的商群 D_3/C_3，这个商群包括两个元素.

如果群的乘法满足交换律，即对任何元素 a_i, a_j 均有

$$a_i \cdot a_j = a_j \cdot a_i$$

则称这种可交换的群为 Abel 群. 显然 Abel 群的左陪集等于右陪集，因而 Abel 群的非平庸子群都是不变子群，它们都可生成商群.

1.2 共轭类

在上节中讨论了用子群及其陪集把群元素分解为若干互不相交的子集的方法. 分类群元素另一个更为重要的方法是定义群元素间的共轭关系，利用共轭性质把群元素分为互不相交的共轭元素类，或简称为类. 类的概念在群论中是十分重要的.

定义 1.2.1 令群 G 包括元素 $e, a, b, c, d, f, \cdots$，对于两个元素 $a, b \in G$，若存在另一元素 $f \in G$，使得 $f \cdot a \cdot f^{-1} = b$，则称 b 与 a 共轭(conjugate)，记为 $b \sim a$.

显然共轭元素是相互共轭，即 b 与 a 共轭，a 也一定与 b 共轭，因为 $f \cdot a \cdot f^{-1} = b$，则 $f^{-1} \cdot b \cdot f = a$. 共轭的另一个性质，是共轭具有传递性，即 $a \sim b$，$b \sim c$，则 $a \sim c$. 因为

$$f \cdot b \cdot f^{-1} = a,\quad g \cdot b \cdot g^{-1} = c$$

则

$$\begin{aligned} a = f \cdot b \cdot f^{-1} &= f \cdot (g^{-1} \cdot c \cdot g) \cdot f^{-1} \\ &= (f \cdot g^{-1}) \cdot c \cdot (g \cdot f^{-1}) = h \cdot c \cdot h^{-1} \end{aligned}$$

其中 $f \cdot g^{-1} = h$，$g \cdot f^{-1} = h^{-1}$. 这说明 $a \sim c$，注意元素之积 $a \cdot b$ 的逆为 $(a \cdot b)^{-1} = b^{-1} \cdot a^{-1}$，亦即交换相乘的元素之顺序，再分别取逆. 这一点容易证明. 因为

$$(a \cdot b) \cdot (b^{-1} \cdot a^{-1}) = a \cdot e \cdot a^{-1} = e$$

$$(b^{-1} \cdot a^{-1}) \cdot (a \cdot b) = b^{-1} \cdot a^{-1} \cdot a \cdot b = b^{-1} \cdot e \cdot b = e$$

由于共轭元素之间具有传递性，因而就可利用共轭对群的元素进行分类.

定义 1.2.2 群 G 内彼此共轭的元素集合称为这个群的一个共轭元素类(conjugate class)，简称为类(class).

由于共轭元素是相互共轭的，而且共轭具有传递性，因而由共轭元素类中的一个元素决定了全部共轭类中的元素，因而包括元素 g 的共轭类，可表示为

$$g\text{类} = \{f \mid f = h_\alpha g h_\alpha^{-1},\ h_\alpha\ \text{取遍群}\ G\}$$

注意：当 h_α 取遍群 G 时，f 可能出现多次，在寻求类时，只保留一个.

由于共轭具有传递性，两个共轭类中不可能有共同的元素，否则将是一个类. 因而可用共轭类把整个群的元素分为类的集合.

Abel 群乘法是可交换的，因而 Abel 群中每个元素自己成为一个类，即

$$a = f \cdot b \cdot f^{-1} = f \cdot f^{-1} \cdot b = e \cdot b = b$$

在任何群中单位元 e 自身为一个类，即

$$f \cdot e \cdot f^{-1} = e$$

不同共轭元素类中所包括的元素数目不一定相同，这一点与陪集都有相同的元素数目是不同的. 为了讨论有限群共轭类内元素的数目，将给出定理 1.2.1. 为了证明这个定理，首先给出两个引理.

引理 1　有限群 G 中与任一元素 g 相交换的所有元素构成 G 的一个子群，记为 H^g，$H^g = \{h \in G | h \cdot g = g \cdot h\}$.

证明　这条引理证明起来是简单的，只须证明 H^g 中包括单位元和在群 G 的乘法下是封闭的，而且 H^g 中若包括 h，则一定也包括 h 的逆 h^{-1} 就可以了. 显然单位元 e 与 g 交换，即 $e \cdot g = g \cdot e$，因而 H^g 中包括单位元. 另一方面若 h_1，$h_2 \in H^g$ 即 $h_1 \cdot g = g \cdot h_1$，$h_2 \cdot g = g \cdot h_2$，则 h_1 与 h_2 之积 $h_3 = h_1 \cdot h_2$ 也与 g 交换，即

$$(h_1 \cdot h_2) \cdot g = h_1 \cdot (h_2 \cdot g) = h_1 \cdot g \cdot h_2 = g \cdot (h_1 \cdot h_2)$$

亦即

$$h_3 \cdot g = g \cdot h_3$$

如果 $h \cdot g = g \cdot h$，则 $h \cdot g \cdot h^{-1} = g$，因而 $h^{-1} \cdot h \cdot g \cdot h^{-1} = h^{-1} \cdot g$，即 $g \cdot h^{-1} = h^{-1} \cdot g$. 因而若 $h \in H^g$，则 $h^{-1} \in H^g$. 这就证明了引理 1.

引理 2　对群 G 的子群 H^g，构造左陪集 $g_1 H^g = \{g_1, g_2, \cdots, g_k\}$，构成这个陪集中元素的充要条件是：

$$g_1 \cdot g \cdot g_1^{-1} = g_2 \cdot g \cdot g_2^{-1} = \cdots = g_k \cdot g \cdot g_k^{-1}$$

证明　如果 $g_2 \in G$，不属于 H^g，它满足条件 $g_1 \cdot g \cdot g_1^{-1} = g_2 \cdot g \cdot g_2^{-1}$，亦即 $g = g_1^{-1} \cdot g_2 \cdot g \cdot g_2^{-1} \cdot g_1$，这表明 $g_1^{-1} \cdot g_2$ 与 g 交换，因而 $g_1^{-1} \cdot g_2 \in H^g$. 于是 $g_1 \cdot g_1^{-1} \cdot g_2$ 是陪集 $g_1 H^g$ 中的一个元素. 反之若 g_2 是陪集 $g_1 H^g$ 中的一个元素则 $g_2 = g_1 \cdot h_i$，$h_i \in H^g$，因而

$$g_2 \cdot g \cdot g_2^{-1} = g_1 \cdot h_i \cdot g \cdot h_i^{-1} \cdot g_1^{-1} = g_1 \cdot g \cdot g_1^{-1}$$

这就证明了这一引理 2.

定理 1.2.1　n 阶有限群每一个共轭类中元素的数目为群 G 阶 n 的因子.

证明　根据陪集定理，群 G 可按子群 H^g 的陪集分解为

$$G = H^g \oplus g_2 H^g \oplus g_3 H^g \oplus \cdots \oplus g_k H^g$$

子群 H^g 和各陪集中的元素均不相同. 令 H^g 的阶为 m，于是

$$H^g = \{h_1 = e, h_2, \cdots, h_m\}$$

$$g_2 H^g = \{g_1 = p_1^1, p_2^1, \cdots, p_m^1\}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$g_kH^g = \{g_k = p_1^k, p_2^k, \cdots, p_m^k\}$$
$$p_k^i = g_i \cdot h_k$$

h_i, p_j^i 都不相同而且包括了群 G 的全部元素.

由于 $h_i \cdot g = g \cdot h_i$, 则

$$h_1 \cdot g \cdot h_1^{-1} = h_2 \cdot g \cdot h_2^{-1} = \cdots = h_m \cdot g \cdot h_m^{-1} = g$$

根据引理 2,

$$p_j^k \cdot g \cdot (p_j^k)^{-1} = p_2^k \cdot g \cdot (p_2^k)^{-1} = \cdots$$
$$= p_m^k \cdot g \cdot (p_m^k)^{-1}$$

并且可证明元素 $p_j^i \cdot g \cdot (p_j^i)^{-1}$ 与 $p_j^l \cdot g \cdot (p_j^l)^{-1}$ 互不相等. 因为若

$$p_j^i \cdot g \cdot (p_j^i)^{-1} = p_j^l \cdot g \cdot (p_j^l)^{-1}$$

则得到

$$(p_j^l)^{-1} \cdot p_j^i \cdot g \cdot (p_j^i)^{-1} \cdot g_j^l = g$$

即

$$((p_j^l)^{-1} \cdot p_j^i) \cdot g \cdot ((p_j^l)^{-1} \cdot p_j^i)^{-1} = g$$

因而要求 g 与 $(p_j^l)^{-1} \cdot p_j^i$ 交换, 如果满足这个条件, $(p_j^l)^{-1} \cdot p_j^i$ 则为 H^g 中的元素, 从而 $g_lH^g = g_iH^g$, 与所设矛盾.

这证明了通过共轭关系子群 H^g 和陪集 g_2H^g, g_3H^g, $\cdots$, g_kH^g 各自给出了包括元素 g 的共轭类中的一个元素, 这些元素包括了这个共轭类的全部元素, 因而

包括元素 g 的共轭类中元素数目 $= \dfrac{(G\text{ 的阶})n}{(H^g\text{ 的阶})m}$, 亦即类中元素的数目为群阶的因子.

例 群 D_3 的共轭类.

D_3 的 6 个元素:

$$e, \quad C_z(2\pi/3), \quad C_z^2(4\pi/3) = C_z^{-1}(2\pi/3), \quad C_1(\pi) = C_1(\pi)^{-1},$$
$$C_2(\pi) = C_2(\pi)^{-1}, \quad C_3(\pi) = C_3(\pi)^{-1}$$

分为 3 个共轭类, 即

$$\{e\}, \quad \{C_z(2\pi/3), \quad C_z^2(4\pi/3)\}, \quad \{C_1(\pi), C_2(\pi), C_3(\pi)\}$$

在上节中我们定义左陪集与右陪集相同的子群为不变子群; 从类的角度看, 也可定义不变子群为包括整个类的元素的子群, 即若不变子群 H 中包括一个元素 h, 则它一定包括与 h 相共轭的全部元素, 这两个定义是完全等价的.

我们首先从后一个定义推出前一个定义, 即不变子群 H 的左陪集和右陪集为

$$gH = \{g \cdot h_i \mid h_i \in H\}$$
$$Hg = \{h_i \cdot g \mid h_i \in H\}$$

由于 H 中包括了与 h_i 相共轭的同一类的元素, 因而 $g^{-1}h_ig$ 也在 H 之内, 于是左陪集中的元素

$$g \cdot (g^{-1} \cdot h_i \cdot g) = h_i \cdot g$$

也出现于右陪集中, 这说明了包括整个类的子群左陪集与右陪集完全相同.

从左右陪集相同定义为不变子群，也可推出这种子群，一定包括整个类的元素．由于

$$gH = Hg, \quad g \in G$$

即

$$\{g \cdot h_1, g \cdot h_2, \cdots, g \cdot h_m\} = \{h_1 \cdot g, h_2 \cdot g, \cdots, h_m \cdot g\}$$

即

$$g \cdot h_k = h_j \cdot g$$

由此得到

$$g \cdot h_k \cdot g^{-1} = h_i, \quad g \in G$$

即 H 中若包括元素 h_i，一定也包括与之共轭的全部元素．

1.3　群的直积与直积群

令两个群 G_1 和 G_2，它们的元素分别为$\{g_{1\alpha}\}$和$\{g_{2\beta}\}$即 $G_1 = \{g_{11}, g_{12}, g_{13}, \cdots, g_{1l}\}$，$G_2 = \{g_{21}, g_{22}, \cdots, g_{2k}\}$．可定义两个群的直积．

定义 1.3.1　包括 n_1 个元素的集合 $G_1 = \{g_{11}, g_{12}, \cdots, g_{1n_1}\}$与包括 n_2 个元素的集合 $G_2 = \{g_{21}, g_{22}, \cdots, g_{2n_2}\}$的直积，为一个新的集合，其中包括 n_1n_2 个元素 $g_{\alpha\beta} = g_{1\alpha}g_{2\beta}$，即

$$G_1 \otimes G_2 = \{g_{\alpha\beta}\}, \quad \alpha = 1, 2, \cdots, n_1, \beta = 1, 2, \cdots, n_2$$

元素 $g_{\alpha\beta}$为 $g_{1\alpha}g_{2\beta} = g_{2\beta}g_{1\alpha}$，亦即元素对 $g_{1\alpha}g_{2\beta}$，它们之间并不存在乘法关系，只是把这一对元素记为集合 G 的一个元素．

定义 1.3.2　若集合 G_1 和 G_2 是两个阶分别为 n_1 和 n_2 的群，它们的直积

$$G_1 \otimes G_2 = G, \quad G = \{g_{\alpha\beta}\}, \quad \alpha = 1, 2, \cdots, n_1, \quad \beta = 1, 2, \cdots, n_2$$

仍然是一个群，称为 G_1 与 G_2 的直积群，记为 $G = G_1 \otimes G_2$．

在群 G_1 和 G_2 内部存在元素间的乘法，直积集合 G 中乘法定义为

$$g_{\alpha\beta} \cdot g_{\gamma\delta} = g_{1\alpha}g_{2\beta} \cdot g_{1\gamma}g_{2\delta} = g_{1\alpha} \cdot g_{1\gamma}g_{2\beta} \cdot g_{2\delta}$$

其中

$$g_{1\alpha} \cdot g_{1\gamma} = g_{1\tau}, \quad g_{2\beta} \cdot g_{2\delta} = g_{2\pi}$$

因而

$$g_{1\alpha} \cdot g_{1\gamma}g_{2\beta} \cdot g_{2\delta} = g_{1\tau}g_{2\pi} = g_{\tau\pi}$$

显然 G 中的单位元为

$$e = e_1e_2$$

可以看到

$$e \cdot g_{\alpha\beta} = e_1e_2 \cdot g_{1\alpha}g_{2\beta} = e_1 \cdot g_{1\alpha}e_2 \cdot g_{2\beta} = g_{1\alpha}g_{2\beta} = g_{\alpha\beta}$$

$$g_{\alpha\beta} \cdot e = g_{1\alpha}g_{2\beta} \cdot e_1e_2 = g_{1\alpha} \cdot e_1g_{2\beta} \cdot e_2 = g_{\alpha\beta}$$

元素 $g_{\alpha\beta}$的逆为

$$g_{\alpha\beta}^{-1} = g_{1\alpha}^{-1}g_{2\beta}^{-1}$$

由定义得到

$$g_{\alpha\beta} \cdot g_{\alpha\beta}^{-1} = g_{1\alpha}g_{2\beta} \cdot g_{1\alpha}^{-1}g_{2\beta}^{-1} = e_1e_2 = e$$

$$g_{\alpha\beta}^{-1} \cdot g_{\alpha\beta} = g_{1\alpha}^{-1}g_{2\beta}^{-1} \cdot g_{1\alpha}g_{2\beta} = e_1e_2 = e$$

由于 G_1 和 G_2 的乘法符合结合律，因而直积群中元素乘法也符合结合律. 显然直积群的元素在上述定义的乘法下是封闭的. 因而 G 确是一个群.

若群 G 包括两个子群 G_1 和 G_2，$G_1 \oplus G_2 = G$，群 G 中的每个元素 $g_{\alpha\beta}$ 都可唯一地表示为 $g_{\alpha\beta} = g_{1\alpha} \cdot g_{2\beta}(g_{1\alpha} \in G_1, g_{2\beta} \in G_2)$，而且按群 G 的乘法 $g_{1\alpha} \cdot g_{2\beta} = g_{2\beta} \cdot g_{1\alpha}$，则称群 G 是其子群 G_1 和 G_2 的直积群，$G = G_1 \otimes G_2$. 容易证明每个子群 G_1 和 G_2 都是不变子群. 此时称 G_1 和 G_2 是 G 的直积因子.

由于 G_1 是 G 的不变子群，可定义商群 $G/G_1 \cong G_2$，同样也可定义商群 $G/G_2 \cong G_1$.

1.4 群的同态与同构

1.4.1 同态

同态(homomorphism)和同构(isomorphism)是群论中的两个重要概念，它们把数学上的抽象群与应用中的具体群沟通起来，是群表示理论的重要基础.

定义 1.4.1 两个非空集合 $X = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$ 和 $Y = \{y_1, y_2, \cdots, y_m\}$，如果存在一种对应关系 f，使 X 中的元素 x_i 与集合 Y 中的唯一一个元素 y_k 相对应，而且这种对应穷尽了集合 Y 中的元素，则称这种对应关系 f 为集合 X 到集合 Y 的映射，记为

$$X \xrightarrow{f} Y$$

把 $x_i \to y_k$ 记为 $f(x_i) = y_k$，即 y_k 是 x_i 的象.

注意把集合 X 映射到集合 Y 的映射 f 只要求 X 中的每一个元素 x_i 与唯一的一个 y_k 对应，但不要求不同的 x_i 对应不同的 y_j. 如果映射 f 使 X 与 Y 中的元素一一对应，则称为满映射.

定义 1.4.2 G 和 H 是两个群，存在映射 f，它把 G 群映射到 H 群，这种映射使 G 的元素 $\{g_0, g_2, \cdots, g_k\}$ 与 H 群的元素 $\{h_0, h_2, \cdots, h_p\}$ 对应起来，而且在映射中保持群中相对应的元素之积也相对应，即

```
g1                 gδ
   \                 \
gα—hλ  , ⋯,  gγ—h2
   /                 /
gβ                 gz
```

而且，若

$$g_\alpha \to h_n, \quad g_\beta \to h_m$$

则

$$g_\alpha \cdot g_\beta \to h_n \cdot h_m$$

称存在这种关系的群 G 与群 H 同态.

一般来讲，群 G 与群 H 同态，不能保证 H 与 G 同态，因为同态只要求群 G 中的若干个元素与群 H 中一个元素对应，并不要求一一对应. 因而群 G 的阶可能大于群 H 的阶.

反之对群 H 来讲，它的一个元素与 G 中若干个元素相对应，这就破坏了群 H 与群 G 同态的条件.

定义 1.4.3　如果群 G 与群 F 同态，群 G 中与群 F 单位元 f_0 相对应的元素集合 $H=\{g_\alpha, \cdots, g_\beta\}$ 称为同态核(kernel of homomororphism).

定理 1.4.1(同态核定理)　若群 G 与群 F 同态，则同态核 H 为群 G 的一个不变子群；而且不变子群 H 对应于 F 群的单位元 f_0，不变子群 H 的每一个独立的陪集 g_iH，对应于 F 中的一个元素 f_i.

证明　首先证明 H 是 G 的子群. 由于同态要求保持乘法结构，因而 G 群的单位元 g_0 一定对应于 F 群的单位元 f_0，否则若 $g_0 \to f_i \neq f_0$，$g_\alpha \to f_\alpha$ 则 $g_0 \cdot g_\alpha = g_\alpha \to f_i \cdot f_\alpha \neq f_\alpha$，所以 f_i 一定是 f_0. H 中的任意两个元素 h_α，h_β 的积 $h_\alpha \cdot h_\beta \to f_0 \cdot f_0 = f_0$，这说明 H 是封闭的. 对于 H 中的任一元素 h_α 的逆 h_α^{-1}，令 $h_\alpha^{-1} \to f_p$，因而有 $h_\alpha \cdot h_\alpha^{-1} \to f_o \cdot f_p$，而 $h_\alpha \cdot h_\alpha^{-1} = g_0 \to f_0$，因而要求 $f_0 \cdot f_p = f_0$，即 $f_p = f_0$. 这说明 $h_\alpha^{-1} \in H$. 从而证明 H 是 G 的一个子群.

进一步证明 H 是不变子群，为此只须证明 H 中若包括元 h_α，则一定包括 h_α 的整个共轭类. 若 $h_\alpha \in H$，则 h_α 的共轭元素 $g_i \cdot h_\alpha \cdot g_i^{-1} \to f_i \cdot f_0 \cdot f_i^{-1} = f_0$，即 H 为不变子群. (同态映射中，若 $g_\alpha \to f_\alpha$，则 $g_\alpha^{-1} \to f_\alpha^{-1}$，否则 $g_\alpha^{-1} \to f_p \neq f_\alpha^{-1}$，则 $g_\alpha \cdot g_\alpha^{-1} = g_0 \to f_\alpha \cdot f_p$，因而是不可能的.)

根据陪集定理，群 G 的全部元素也可分解为不变子群 H 和它的不相交的陪集，即

$$G = \{H, g_2H, g_3H, \cdots, g_kH\}$$

上式说明 $H \to f_0$. 若 $g_i \to f_i$，则陪集 g_iH 的全部元素都对应于 f_i，因为 $g_i \cdot h_\alpha \to f_i \cdot f_0 = f_i$，$h_\alpha \in H$. 而且不同陪集 g_iH 和 g_jH 对应于不同的 f_i 和 f_j. 如果 f_i 和 f_j 相同，则 $g_i \cdot h_\alpha \to f_i \cdot f_0 = f_i$，$g_j \cdot h_\alpha \to f_j \cdot f_0 = f_j = f_i$，对上式左乘 g_i^{-1} 得到 $g_i^{-1} \cdot g_j \cdot h_\alpha \to f_i^{-1} \cdot f_j \cdot f_0 = f_0$，即 $g_i^{-1} \cdot g_j \cdot h_\alpha \in H$，这与 g_i，g_j 不属于 H，而且 $g_i \neq g_j$ 是相矛盾的，因而只能 $f_i \neq f_j$. 这便证明了定理的第二部分.

由这个定理可得群 G 与群 F 同态时，群的阶数之间的关系.

推论：如果 n 阶群 G 与 m 阶群 F 同态，同构核的阶数为 k，则 $n = km$.

例 1　D_3 群与二维空间的反演群 I 同态.

三维空间反演群 I 包括两个元素，即 $\{e, i\}$，e 为单位元，i 为空间反演. D_3 群的元素为

$$e,\quad C_z(2\pi/3),\quad C_z(4\pi/3),\quad C_1(\pi),\quad C_2(\pi),\quad C_3(\pi).$$

D_3 群的不变子群为

$$\{e, C_z(2\pi/3), C_z(4\pi/3)\}$$

同态的对应关系为

$$D_3 \to I$$

$$H = \{e, C_z(2\pi/3), C_z(4\pi/3)\} \to e$$

$$C_1(\pi)H = \{C_1(\pi), C_2(\pi), C_3(\pi)\} \to i$$

不变子群 $H = \{e, C_z(2\pi/3), C_z(4\pi/3)\}$ 为同态核，它的陪集 $C_1(\pi)H = \{C_1(\pi), C_2(\pi), C_3(\pi)\}$ 对应于 i.

1.4.2 同构

定义 1.4.4 两个阶相同的群 G 和 F，存在一种一一对应的映射，即群 G 的元素与群 F 中的元素一一对应，而且若 $g_i \to f_i$，$g_j \to f_j$，则 $g_i \cdot g_j = g_k$ 也对应于 $f_i \cdot f_j = f_k$，即 $g_k \to f_k$，则称存在这种关系的群 G 与 F 同构，当然 F 也与 G 同构.

显然同构是一种特殊的同态.

例 2 三个对象的置换群 S_3 与 D_3 群同构.

n 个对象的置换群由 n 个对象的全部置换构成，记为 S_n，其阶数为 $n!$. 置换群的元素可表示为

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n \end{pmatrix}$$

$i_1, i_2, \cdots, i_n$ 取 $1, 2, \cdots, n$ 中的不同数值，它的意义是 n 个对象的一种置换，在这个置换中，1 换为 i_1，2 换为 i_2，…，k 换为 i_k，n 换为 i_n.

S_3 群的元素为

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

D_3 群的六个元素为

$$C_z(2\pi/3), \quad C_z^2(4\pi/3), \quad C_1(\pi), \quad C_2(\pi), \quad C_3(\pi), \quad e$$

在它们之间可建立对应关系：

$$e \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad C_z(2\pi/3) \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}; \quad C_z^2(4\pi/3) \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$
$$C_1(\pi) \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}, \quad C_2(\pi) \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad C_3(\pi) \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

从两个群的乘法可看到这种对应关系也保证积的相互对应.

例 3 群 G 的两个共轭子群相互同构.

如果 H 是群 G 的子群，H 的共轭子群 $\tilde{H}$ 为 $gHg^{-1}(g \in G)$，显然共轭子群 $\tilde{H} = gHg^{-1}$ 与 H 同构，对应关系为

$$H \to \tilde{H}, \quad h_i \to gh_ig^{-1}$$

而且

$$h_\alpha \cdot h_\beta \to (g \cdot h_\alpha \cdot g^{-1}) \cdot (g \cdot h_\beta \cdot g^{-1}) = g \cdot h_\alpha \cdot h_\beta \cdot g^{-1}$$

两个同构的群，有相同的乘法结构，有限群有相同的乘法表，因而从纯数学角度来看，它们是完全相同的. 两个群 G 和 F 同构，记为 $G \simeq F$.

1.5 线性空间和线性变换群，线性变换群的矩阵表示

线性空间(linear space)也称线性向量空间，是一个重要的数学概念. 它是一个定义

空间内元素(一般称为向量)间的加法和空间内元素(向量)与数域K内数的乘法的集合.下面给出严格的定义.

定义 1.5.1　由向量x, y, z, …, 组成的向量集合V, 对向量定义加法，而且加法遵从交换律，即

$$x + y = y + x, \quad x, y \in V$$

并且存在唯一的一个零元素，记为0，使

$$0 + x = x + 0 = x$$

定义向量与数域K内的数的乘法，即

$$a(x + y) = ax + ay, \quad a \in K$$
$$(ab)x = a(bx)$$
$$(a + b)x = ax + bx$$

对数域中的1有$1x = x$, 对数域中的-1有$-1x = -x$, $x + (-x) = 0$. 这种集合V称为数域K上的线性空间，如果K是实数域$\mathbf{R}$则称为实线性空间，K为复数域$\mathbf{C}$则称为复线性空间.

显然线性空间是一个 Abel 群，此时把空间中的向量视为群元素，把向量间的加法视为群的乘法，0 向量为群的单位元，向量x的逆为$-x$.

线性空间中的向量可分为线性相关的或线性无关的，这是向量空间的一种重要关系.

定义 1.5.2　如果线性空间V中的一组向量$x_1, x_2, \cdots, x_l \in V$, 存在一组不全为0的数$a_1, a_2, \cdots, a_l \in K$, 使

$$\sum_{i=1}^{l} a_i x_i = 0$$

则称向量$x_1, x_2, \cdots, x_l$是线性相关的，反之，若不存在不全为0的一组实数，则这组向量是线性无关的.

有了线性无关的概念，就可定义线性空间的维数. 如果在线性空间V中，最多只能有n个向量是线性无关的，也就是说任何$(n+1)$个向量一定是线性相关系的，这时称线性空间是n维的.

对n维的线性空间V, 可任意选择n个线性无关的向量$e_1, e_2, \cdots, e_n$作为V的基向量或称基矢(basis)，于是V中任意向量x都可表示为这组基矢的线性组合. 因为按定义，基矢以外的任何向量x都与整个基矢线性相关，即

$$\sum_{i=1}^{n} a_i e_i + bx = 0$$

或写为

$$x = \sum_{i=1}^{n}\left(-\frac{a_i}{b}\right)e_i = \sum_{i=1}^{n} x_i e_i, \quad x_i = -\frac{a_i}{b}$$

称这n个数$x_i = -\dfrac{a_i}{b}$, $i = 1, 2, \cdots, n$为向量x对基矢$e_1, e_2, \cdots, e_n$的坐标.

在线性空间V上可定义线性变换.

定义 1.5.3 若变换 A 是把空间 V 映射到 V 的映射，它把 V 中的向量 x 变为 y，x，$y \in V$，即

$$A(x) = y$$

而且

$$A(ax + by) = aA(x) + bA(y)$$

则称 A 为线性空间 V 上的线性变换. 变换的线性表现在上述第二个式子上.

两个线性变换 A 和 B，相继施加于向量 x 得到

$$B(A(x)) = B(y) = z$$

它的结果相当于另一个变换 C 使

$$C(x) = z$$

因而可定义线性变换的乘积，即

$$BA = C, \quad BA(x) = C(x)$$

而且$[C(BA)](x)$，$=[(CB)A](x)$，即线性变换之积遵循结合律.

也可定义线性变换 A 和 B 间的加法，即

$$(A + B)(x) = A(x) + B(x)$$

还可定义线性变换与数 a 的乘法，即

$$(aA)(x) = a[A(x)]$$

如果线性变换是满映射，即 A 把矢量 x 变换为 y，而且对不同向量的变换其结果是不相同的，即

$$A(x) = y, A(x') = y', \text{若 } x \neq x', \text{则 } y \neq y'$$

于是一定存在一个变换 A^{-1}把 y 变为 x，即

$$A^{-1}(y) = x$$

而且

$$A^{-1}A(x) = (A^{-1}A)(x) = A^{-1}(A(x)) = A^{-1}(y) = x$$

因而

$$A^{-1}A = E$$

另一方面

$$(AA^{-1})(y) = A(A^{-1}(y)) = A(x) = y, \quad AA^{-1} = E$$

可见 E 为保持向量 x 或 y 不变的变换，因为 x，y 是任意向量，E 为空间 V 中把向量变换为自身的变换.

由上面分析可看到，线性空间 V 上的全部满映射所构成的线性变换，构成一个群. 这个群的乘法为线性变换乘法，单位元为 E，线性变换 A 的逆为 A 的逆变换 A^{-1}. 称这个群为定义数域 $\mathbf{C}$ 上的 n 维线性空间 V 上的一般线性变换群(linear transformation group)，记为 $GL(n, \mathbf{C})$.

如果向量 x 对基矢 e_1，e_2，…，e_n 展开为

$$x = \sum_{i=1}^{n} x_i e_i$$

则线性变换 A 作用后得

$$A(x)=A\left(\sum_{i=1}^{n}x_ie_i\right)=\sum_{i=1}^{n}x_iA(e_i)$$

因而A的性质完全由A对基矢$e_1, e_2, \cdots, e_n$的作用决定. $A(e_i)$也是V空间的一个向量，因而也可由基矢表示，可令

$$A(e_i)=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}e_j$$

于是对全部基矢得到一个以a_{ij}为矩阵元的矩阵，这个矩阵描述变换A. 因而，可把线性变换A表示为以a_{ij}为矩阵元的矩阵，即

$$A=\begin{pmatrix}a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}\end{pmatrix}\tag{1.5.1}$$

逆变换A^{-1}为矩阵A的逆矩阵，矩阵A存在逆矩阵的条件是

$$\det A\neq 0\tag{1.5.2}$$

这种行列式不为0的矩阵称为非奇异矩阵. 这说明$GL(n, \mathbf{C})$群的线性变换可由全部$n\times n$的非奇异矩阵表示. 每个满映射的线性变换可在一定基矢下表示为一个$n\times n$的非奇异矩阵. 线性变换间的乘法为矩阵的乘法. 因为两个矩阵之积的行列式为

$$\det(AB)=\det A\det B$$

所以非奇矩阵之积仍为非奇矩阵，非奇矩阵之积是封闭的.

可以把线性空间的基矢$e_1, e_2, \cdots, e_n$写为列矩阵

$$\begin{pmatrix}e_1\\ e_2\\ \vdots\\ e_n\end{pmatrix}$$

向量x在这组基矢中的坐标$x_1, x_2, \cdots, x_n$写为行矩阵

$$(x_1, x_2, \cdots, x_n)$$

于是向量x为行矩阵和列矩阵之积，即

$$x=(x_1, x_2, \cdots, x_n)\begin{pmatrix}e_1\\ e_2\\ \vdots\\ e_n\end{pmatrix}=\sum_{i=1}^{n}x_ie_i\tag{1.5.3}$$

线性变换A作用于向量x得到

$$A(x)=\sum_{i=1}^{n}x_iA(e_i)=(x_1, x_2, \cdots, x_n)\begin{pmatrix}a_{11} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & & \vdots\\ a_{n1} & \cdots & a_{nn}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e_1\\ e_2\\ \vdots\\ e_n\end{pmatrix}=y\tag{1.5.4}$$

向量y的坐标为$(y_1, y_2, \cdots, y_n)$，于是

$$(y_1, y_2, \cdots, y_n) = (x_1, x_2, \cdots, x_n)\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \tag{1.5.5}$$

由矩阵乘法得到

$$y_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ji} x_j$$

对于一个线性变换 A，它的矩阵表示与基矢选择有关. 如果对基矢 $e_1, e_2, \cdots, e_n$，它的表示矩阵为 A，而对另一组基矢 $e_1', e_2', \cdots, e_n'$，变换 A 的表示矩阵为 A'，则 矩阵 A 与 A'间的关系，由两组基矢间的变换矩阵决定.

若两组基矢 $e_1, e_2, \cdots, e_n$ 和 $e_1', e_2', \cdots, e_n'$ 之间的变换关系为

$$M\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1' \\ e_2' \\ \vdots \\ e_n' \end{pmatrix} \quad 或 \quad M^{-1}\begin{pmatrix} e_1' \\ e_2' \\ \vdots \\ e_n' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} \tag{1.5.6}$$

M 为基矢间的变换矩阵，上式展开后为

$$e_i' = \sum_{j=1}^{n} m_{ij} e_j \quad 或 \quad e_i = \sum_{j=1}^{n} m_{ij}^{-1} e_j'$$

m_{ij}为矩阵 M 的矩阵元.

向量 x 在两组基矢中的表示分别为

$$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = (x_1', x_2', \cdots, x_n')\begin{pmatrix} e_1' \\ e_2' \\ \vdots \\ e_n' \end{pmatrix}$$

线性变换 A 作用于向量 x，则为

$$A(x) = (x_1, \cdots, x_n)\hat{A}\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = (x_1', \cdots, x_n')\hat{A}'\begin{pmatrix} e_1' \\ e_2' \\ \vdots \\ e_n' \end{pmatrix}$$

其中 $\hat{A}$ 是 A 的对基矢 $e_1, e_2, \cdots, e_n$ 的矩阵表示，$\hat{A}'$是 A 的对基矢 $e_1', \cdots, e_n'$ 的矩阵表示. 由于向量 x 对基矢 $e_1', e_2', \cdots, e_n'$ 的坐标

$$(x_1', x_2', \cdots, x_n') = (x_1, x_2, \cdots, x_n)M^{-1}$$

因而

$$(x_1', x_2', \cdots, x_n')\hat{A}'\begin{pmatrix} e_1' \\ e_2' \\ \vdots \\ e_n' \end{pmatrix} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)M^{-1}\hat{A}'M\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix}$$

由此得到

$$\hat{A} = M^{-1}\hat{A}'M \quad 或 \quad \hat{A}' = M\hat{A}M^{-1} \tag{1.5.7}$$

这说明线性变换 A 在不同基矢中的表示矩阵间的关系，由基矢间的变换矩阵决定. 为了符号简单，通常把矩阵 $\hat{A}$, $\hat{A}'$记为 A, A'.

通过上述讨论说明 n 维线性空间中的一般线性变换群 $GL(n, \mathbf{C})$，可表示为 $n\times n$ 的非奇矩阵群. 这个群的矩阵元 a_{ij}取数域 $\mathbf{C}$ 内的数. $n\times n$ 的非奇矩阵群是 $GL(n, \mathbf{C})$群在选定空间基矢后的具体表示. 与线性变换 A 相对应的 $n\times n$ 的非奇矩阵是线性变换 A 的表示矩阵. 或者说 n 维线性空间上定义的全部非奇矩阵群与 $GL(n, \mathbf{C})$群同构.

1.6　内积空间与酉变换

在线性空间中并没有向量长度的概念，为了表示向量长度，引入内积(inner product)从而定义出内积空间(inner product space).

定义 1.6.1　如果对线性空间 V 中任意两个向量 x 和 y，都存在一个数 $a\in C$ 与之对应，记为$(x, y)=a$，而且(x, y)具有如下性质：

(1) $(x, x)\geqslant 0$，仅当 $x=0$ 时，$(x, x)=0$；

(2) $(x, y)=(y, x)^*$，$(y, x)^*$为数(y, x)的共轭复数；

(3) $(x_1+x_2, y)=(x_1, y)+(x_2, y)$；

(4) $(ax, y)=a^*(x, y)$；

则称(x, y)为向量 x 与 y 的内积，定义有内积的线性空间称为内积空间.

由性质(2)和(3)可导出

$$(x_1, y_1+y_2) = (x_1, y_1) + (x_1, y_2)$$

由性质(2)和(4)可导出

$$(x, ay) = a(x, y)$$

定义 1.6.2　如果两个向量 x, y，它们的内积$(x, y)=0$，则称向量 x 与向量 y 正交，记为 $x\perp y$.

定理 1.6.1　相互正交的向量是线性无关的.

证明　设一组向量 x_1, x_2, $\cdots$, x_n 是相互正交的，如果它们是线性相关的，则存在一组非 0 的数 a_1, a_2, $\cdots$, a_n，使

$$\sum_{i=1}^{n} a_i x_i = 0$$

取这组正交向量中的任一向量 x_j 做内积，则

$$\left(\sum_i a_i x_i, x_j\right) = \sum_i a_i^* (x_i, x_j) = \sum_i a_i^* \delta_{ij} b_j = b_j a_j^* = 0$$

其中

$$(x_i, x_j) = b_j \delta_{ij}, \quad (x_j, x_j) = b_j$$

当 $x_j\neq 0$ 时，$b_j\neq 0$，这说明 a_1, a_2, $\cdots$, a_n 均为0，即不存在一组非 0 的数 a_1, $\cdots$, a_n，使前述等式成立，因而 x_1, x_2, $\cdots$, x_n 是线性无关的.

有了相互正交的向量是线性无关的这种性质，就可选择正交基矢，这在使用上是十分方便的.

定义 1.6.3 称向量 x 与本身的内积 (x, x) 为向量 x 的模. 对实空间的向量，模即为它的长度的平方，通常记为 $|x|^2=(x, x)$.

有了模的概念，就可对正交基进行归一化，使之成为正交归一化的基矢，即令正交基矢 $e_1, e_2, \cdots, e_n$ 中每一个基矢的模为 1，亦即

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij}$$

在正交归一化基矢中向量 x 和 y 为

$$x = \sum_{i=1}^{n} x_i e_i, \quad y = \sum_{i=1}^{n} y_i e_i$$

则它们的内积为

$$(x, y) = \left(\sum_i x_i e_i, \quad \sum_j y_j e_j\right) = \sum_i x_i^* y_i$$

向量 x 的模为

$$(x, x) = \sum_i x_i^* x_i$$

对实空间的向量

$$(x, x) = \sum_i x_i^2$$

与通常向量长度的定义是一致的.

在内积空间中，选择一组正交规一化的基矢 $e_1, e_2, \cdots, e_n$，空间内的任一向量 x 都可表示为

$$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1} x_i e_i$$

线性变换 A 作用 x 后得到

$$A(x) = (x_1, x_2, \cdots, x_n) A \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix}$$

$$= (x_1', x_2', \cdots, x_n')\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = \sum_i x_i' e_i = x'$$

A 为 $n\times n$ 的矩阵，变换后的坐标 $(x_1', x_2', \cdots, x_n')$ 为，

$$x_i' = \sum_{j=1}^{n} a_{ji} x_j$$

x 自身的内积为

$$(x, x) = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i e_i,\ \sum_{j=1}^{n} x_j e_i\right) = \sum_i x_i^* x_i \tag{1.6.1}$$

x'自身的内积为

$$(x', x') = \sum_i x_i^* x_i' = \sum_i^n \left(\sum_{j=1}^n a_{ji}^* x_j^*\right)\left(\sum_{k=1}^n a_{ki} x_k\right)$$

$$= \sum_{i=1}^n \sum_{j,k} a_{ji}^* a_{ki} x_j^* x_k \tag{1.6.2}$$

如果变换A保持向量的模不变，即

$$(x, x) = (x', x') \tag{1.6.3}$$

则要求

$$\sum_i a_{ji}^* a_{ki} = \delta_{jk}$$

同样，利用$x = A^{-1}(x')$可得到$\sum\limits_i a_{jl}^* a_{jk} = \delta_{lk}$. 满足这种要求的矩阵$A$为酉矩阵(unitary matrix). 所谓酉矩阵即矩阵的逆等于矩阵的厄米共轭矩阵，矩阵A的厄米共矩阵A^+为

$$A^+ = \tilde{A}^* \quad 即 \quad a_{ij}^* = a_{ji}^*$$

$\tilde{A}$表示A的转置矩阵，A^+为矩阵A转置然后对矩阵元取复数共轭. 对于酉矩阵$A^+ = A^{-1}$，则

$$AA^{-1} = AA^+ = E, \quad A^{-1}A = A^+ A = E$$

于是

$$\delta_{ij} = \sum_k a_{ik}^{-1} a_{kj} = \sum_k a_{ik}^{+} a_{kj} = \sum_k a_{ki}^{*} a_{kj} \tag{1.6.4}$$

E为$n \times n$的单位矩阵.

上述讨论证明了由酉矩阵表示的线性变换保持变换前后向量的模不变. 容易证明酉矩阵不仅保持向量模不变，而且还保持所有向量的内积不变.

因

$$\det A^+ \det A = \det \tilde{A}^* \det A = (\det A)^* \det A = 1$$

故酉矩阵的行列式为

$$\det A = e^{i\alpha}, \quad \alpha 为实数 \tag{1.6.5}$$

因而酉矩阵是非奇矩阵，而且酉矩阵之积仍然为酉矩阵.

因为，若A，B为酉矩阵，它们之积

$$AB = C$$

则

$$C^+ = B^+ A^+, \quad C^+ C = B^+ A^+ AB = E$$

而且

$$\det C = \det A \det B = e^{i(\alpha+\beta)}, \quad \det A = e^{i\alpha}, \quad \det B = e^{i\beta}$$

所习$AB = C$为酉矩阵.

这表明n维内积空间中全部保持向量内积不变的线性变换构成一个群，称为n维酉群(unitary group)，记为$U(n, \mathbf{C})$，称这种变换为酉变换(unitary trans for mation). 定义

在 n 维空间上的全部酉矩阵也构成一个群，这两个群相互同构，称全部酉矩阵构成的群为 $U(n, \mathbf{C})$ 的表示，或酉矩阵是酉变换的表示矩阵.

酉矩阵的一个子集，即单模酉矩阵

$$\det A = 1 \tag{1.6.6}$$

它们在矩阵乘法下是封闭的，即单模酉矩阵之积还是单模酉矩阵.

$$\det(AB) = \det A \det B = 1 \cdot 1 = 1$$

因而这个子集构成一个子群，称为 n 维空间的单模酉群，记为 $SU(n, \mathbf{C})$.

如果一个矩阵 A，它的逆等于它的转置，即

$$\tilde{A} = A^{-1}$$

称为正交矩阵，正交矩阵的行列式或模为 ±1，即

$$\det A = \det \tilde{A} = \pm 1 \tag{1.6.7}$$

因而 n 维空间中全部正交矩阵构成一个群，称为正交群，记为 $O(n, \mathbf{C})$. 它是 $GL(n, \mathbf{C})$ 的子群. 在复空间中 $\tilde{A} \neq A^{-1} = A^{+}$. 因而群 $O(n, \mathbf{C})$ 不能保持向量模不变. 若空间是实的，则正交矩阵也是酉矩阵，因而实空间中 $U(n, \mathbf{R})$ 群与 $O(n, \mathbf{R})$ 是相同的. 实空间中的单模酉群 $SU(n, \mathbf{R})$ 与单模正交群 $SO(n, \mathbf{R})$ 是完全相同的. 它在几何上表示 n 维实空间向量的旋转，也称为 n 维空间的旋转群，记为 $\mathbf{R}_n$. 作为 $\mathbf{R}_n$ 的特例，即 $\mathbf{R}_3$，它是三维空间的旋转群.

1.7 群的表示

1.7.1 群表示的定义

群的表示理论是群论的重要内容，而且是群论在各种学科中应用的主要基础. 实际上在上节中我们已经应用了群表示的概念，在这节中给出群表示的精确定义，并讨论各种类型的表示.

定义 1.7.1 群 G 到线性空间 V 上线性变换群 $GL(n, \mathbf{C})$ 的一个子群 M 的同态映射 f 称为群 G 的一个线性表示，线性空间 V 为群 G 的表示空间，空间 V 的维数 n 为表示的维数，即

$$G \xrightarrow{f} M \subset GL(n, \mathbf{C})$$

因而对群 G 的任一元素 $g_i \in G$，都有一个线性变换 A 与之对应，记为

$$g_i \to A(g_i), \quad A(g_i) \in M$$
$$g_i^{-1} \to A(g_i^{-1}) = A(g_i)^{-1}$$

而且

$$g_i g_j \to A(g_i) A(g_j)$$

如果在线性空间 V 中选择一组基，则 $GL(n, \mathbf{C})$ 的子群 M 可表示为 $n \times n$ 的非奇矩阵群，因而 G 也与这个矩阵群同态，矩阵群 M 也是 G 的一个表示. 因此，也可等价定义群的表示为：

定义 1.7.1′　如果群 G 与 $n\times n$ 的矩阵群 M 同态，则称矩阵群 M 为抽象群 G 的表示(representation).

这两种定义显然是等价的. 前面已指出由第一个定义可推出第二个定义，现在从第二个定义出发，推出第一个定义. 因为 $n\times n$ 矩阵群中的每一个矩阵一定是非奇异矩阵，因为非奇异矩阵才有逆矩阵存在. 每个非奇异矩阵是在一定基矢中线性变换的表示矩阵. 因而群 G 与非奇矩阵群同态，也就是与这个非奇异矩阵群所表示的线性变换群 $GL(n,\ \mathbf{C})$ 中的一个子群同态.

群的表示本质上是把抽象群 G 与线性变换群或矩阵群联系起来，从而利用矩阵群来讨论抽象群，这在群论的理论和应用中都是非常重要的.

在线性空间中选定一组基矢后，就可对线性变换群的每一个元素给出一个表示矩阵，也就是说线性变换群的矩阵表示由基矢的选择决定. 不同基矢有不同的矩阵表示，但是不同基矢下，同一个线性变换的矩阵之间存在变换关系，即

$$A = MA'M^{-1} \tag{1.7.1}$$

其中矩阵 A 和 A' 分别为基矢 $e_1,\ e_2,\ \cdots,\ e_n$ 和 $e_1',\ e_2',\ \cdots,\ e_n'$ 下的同一线性变换的表示矩阵，M 是两组基矢间的变换矩阵. 则称 A 和 A' 是群 G 的两个等价表示.

定义 1.7.2　如果表示空间 V 上的矩阵群 $\{A(g_\alpha),\ g_\alpha\in G\}$ 是群 $G=\{g_1,\ g_2,\ \cdots,\ g_k\}$ 的一个表示，而空间 V 中另一个矩阵群 $\{A'(g_\alpha),\ g_\alpha\in G\}$ 也是 G 的一个表示，若这两种表示之间存在变换关系.

$$A(g_\alpha) = MA'(g_\alpha)M^{-1}$$

则称表示 A' 与 A 是等价的表示.

一般空间中的单位矩阵 E 的特殊情况是一维空间的 1 可以认为是阶为 1 的矩阵群，任何群 G 都与一阶矩阵群同态. 因而，1 是所有群的一个 1 维恒等表示.

定义 1.7.3　如群 G 与线性变换群或矩阵群 M 不仅同态，而且还同构，因而群 G 的元素 $g\in G$ 与矩阵群中的矩阵 M 一一对应，称这种表示为忠实表示(failhful repersentation)..

忠实表示在表示理论中是十分重要的，作为抽象群的忠实表示的矩阵群与抽象群有相同的阶、有相同的乘法结构，因而对矩阵群的研究就可给出与之同构的抽象群的重要性质.

例 1　n 维线性空间的一般线性变换群与 $n\times n$ 的非奇矩阵群同构，因而 $n\times n$ 非奇矩阵群是 $GL(n,\ \mathbf{C})$ 的忠实表示.

例 2　n 维内积空间中保持向量模不变的线性变换群 $U(n)$ 与 n 维内积空间中全部酉矩阵构成的群同构，即 $n\times n$ 的酉矩阵群是 $U(n,\ \mathbf{C})$ 的忠实表示. 实 n 维内积空间保持向量模不变的线性变换群，即实正交群 $O(n,\ \mathbf{R})$ 与 $n\times n$ 的实正交矩阵群同构，它的单模子群，构成 $SO(n,\ \mathbf{R})$ 群，即 n 维实空间旋转群，也可记为 $\mathbf{R}_n$.

1.7.2　三维空间中的旋转群的矩阵表示

三维空间中的转动，可表示为单模 3×3 的实正交矩阵. 如取坐标系 $(x,\ y,\ z)$，则绕 x 轴，y 轴，z 轴转 θ 角的转动分别为

$$R_x(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

通常由所谓 Euler 角(α, β, γ)定义转动，转动$R(\alpha, \beta, \gamma)$是一个复合转动. 它表示先绕 z 轴转 γ 角，再绕转动后的 y 轴(记为 y')转 β 角，最后绕经历两次转动的新的 z 轴(记为 z'')转 α 角，而构成的一个复合转动. 第一个转动使向量 $\boldsymbol{r}$ 变为 $\boldsymbol{r}'$，即

$$\boldsymbol{r}' = R_z(\gamma)\boldsymbol{r},\ R_z(\gamma) = \begin{pmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma & 0 \\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

然后绕 y'转 β 角，使 $\boldsymbol{r}'$变为 $\boldsymbol{r}''$，即

$$\boldsymbol{r}'' = R_{y'}(\beta)\boldsymbol{r}' = R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)\boldsymbol{r}$$

$$R_{y'}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix}$$

最后绕 z''转 α 角，使 $\boldsymbol{r}''$变为 $\boldsymbol{r}'''$，即

$$\boldsymbol{r}''' = R_{z''}(\alpha)\boldsymbol{r}'' = R_{z''}(\alpha)R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)\boldsymbol{r}$$

$$R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

用复合转动 $R(\alpha, \beta, \gamma)$表示上述复合转动，即

$$R(\alpha, \beta, \gamma)\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'''$$

于是

$$\begin{aligned} &R(\alpha, \beta, \gamma) \\ &= \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \sin\alpha\sin\gamma & -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma - \cos\gamma\sin\alpha & \sin\beta\cos\alpha \\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \sin\gamma\cos\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma + \cos\alpha\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta \\ -\cos\gamma\sin\beta & \sin\gamma\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.7.2)$$

α, β, γ 的定义域为 $-\pi < \alpha < \pi,\ 0 \leqslant \beta \leqslant \pi,\ -\pi \leqslant \gamma \leqslant \pi$.

例 D_3 群的三维表示.

D_3 是保持正三角形不变的转动构成的群. 下面给出正三角形 z 轴垂直 xy 平面，y 轴

为一个角的平分线，另一个为 x 轴. 绕 z 轴转动 $2\pi/3$ 和 $4\pi/3$ 的两个转动矩阵为

$$C_z(2\pi/3)=\begin{pmatrix}\cos 2\pi/3 & -\sin 2\pi/3 & 0\\ \sin 2\pi/3 & \cos 2\pi/3 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$C_z(4\pi/3)=\begin{pmatrix}\cos 4\pi/3 & -\sin 4\pi/3 & 0\\ \sin 4\pi/3 & \cos 4\pi/3 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

绕第一分角线转 π 的矩阵为

$$C_y(\pi)=\begin{pmatrix}\cos\pi & 0 & \sin\pi\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\pi & 0 & \cos\pi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

绕第二个分角线转 π 的转动，可由绕 z 轴转 $\pi/3$，把 y 转变为第二个分角线，绕这个 y 转 π 角后再绕 z 轴转 $-\frac{\pi}{3}$来完成，即

$$\begin{aligned}C_2(\pi)&=C_z\left(-\frac{\pi}{3}\right)C_y(\pi)C_z\left(\frac{\pi}{3}\right)\\&=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\end{aligned}$$

同理绕第三角的分角线转 π 的变换为

$$\begin{aligned}C_3(\pi)&=C_z\left(-\frac{2\pi}{3}\right)C_y(\pi)C_z\left(\frac{\pi}{3}\right)\\&=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$
= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}
$$

单位 e 为单位矩阵，即

$$
e = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.
$$

这便给出了 D_3 群的三维忠实表示的表示矩阵

1.7.3 变换作用于函数空间以及变换的矩阵表示

三维空间的线变换群不仅可在三维空间中表示为 3×3 的矩阵群，而且还可在 n 维函数空间中建立起 n 维表示，即与 n 维函数空间的 $n\times n$ 的矩阵同构.

令 F 为函数空间，即 F：$\{f_1(\boldsymbol{r}), f_2(\boldsymbol{r}), \cdots, f_n(\boldsymbol{r})\}$ 为一函数集合.

定义与三维空间中线性变换 R 相对应的算符 $\hat{P}(R)$ 对函数空间 F 中的任意函数 $f(\boldsymbol{r})$ 的作用为

$$
\hat{P}(R)f(\boldsymbol{r}) = f(R^{-1}\boldsymbol{r}) = f'(\boldsymbol{r})
$$

如果函数空间 F 中最多只存在 n 个线性无关的函数，则称 F 是 n 维的函数空间. 在函数空间 F 中取 n 个线性无关的函数 $e_1(\boldsymbol{r}), \cdots, e_n(\boldsymbol{r})$ 为函数空间 F 的基函数，则任一函数可由这组基矢表示为

$$
f(\boldsymbol{r}) = f_1e_1(\boldsymbol{r}) + f_2e_2(\boldsymbol{r}) +, \cdots, + f_ne_n(\boldsymbol{r}) = (f_1, f_2, \cdots, f_n)\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix}
$$

于是

$$
\hat{P}(R)f(\boldsymbol{r}) = (f_1, f_2, \cdots, f_n)\hat{P}(R)\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = (f_1, f_2, \cdots, f_n)\begin{pmatrix} e_1' \\ e_2' \\ \vdots \\ e_n' \end{pmatrix}
$$

因而

$$
\hat{P}(R)e_i(r) = e_i'(r) = \sum_i P(R)_{ij}e_j = e_i(R^{-1}\boldsymbol{r})
$$

与变换 R 相似的由此就可确定出一个矩阵 $P(R)$，它的矩阵元为 $P(R)_{ij}$，称矩阵 $P(R)$ 为变换 $\hat{P}$ 在函数空间 F 上的表示. 如果全部变换 R 构成一个群 G，则称这些矩阵为群 G 在 n 维空间 F 中的表示.

1.8 可约表示与不可约表示

在一个表示空间中，可选取无穷多组基矢，因而可得到无穷多个表示，然而这些表示都是等价表示(equivalent representations)，它们之间的变换关系依赖于基矢间的变换关系. 因而只有相互不等价的表示对于群才是重要的. 这就需要对群的表示进行分类，以便研究那些在本质上是不同的表示. 在这种分类中不等价的不可约表示(irreducible representation)是最重要的.

定义 1.8.1(不变子空间与空间的直和)　如果 n 维线性空间 V 包括一个 m 维子空间 W，子空间 W 中的任一向量 $x\in W$，在群 G 的所有元素作用下，$gx=x'(g\in G)$ 仍在子空间 W 之中，即 $x\in W$，$gx=x'\in W(g\in G)$，则称 W 为群 G 的不变子空间.

如果 n 维线性空间 V 存在群 G 的两个不变子空间 V_1(n_1 维)和 V_2(n_2 维)，$n_1+n_2=n$，空间 V 中的任意向量 x 均可唯一地表示为

$$x = x_1 + x_2,\quad x_1\in V_1,\quad x_2\in V_2$$

则称空间 V 为子空间 V_1 和 V_2 的直和，记为

$$V = V_1 \oplus V_2$$

在不变子空间的基础上，可定义可约表示，即：

定义 1.8.2　线性空间 V 是群 G 的表示空间，群 G 在这个空间上的表示矩阵群为 A，若空间 V 包括群 G 的不变子空间，则称表示 A 是可约表示(reducible representation).

如果 G 群的表示空间 V 中存在一个不变子空间 W，则 G 群的表示矩阵 $A(g_\alpha)$，把不变子空间 W 内的向量仍然变换为 W 内的向量，即 $x\in W$，$A(g)x\in W$，$g\in G$. 这说明对表示空间 V，可选择一组基矢 $e_1,\cdots,e_m,e_{m+1},\cdots,e_n$，其中 $e_1,e_2,\cdots,e_m$ 是不变子空间 W 的基矢，在这组基矢中，表示矩阵具有形式

$$A(g_\alpha) = \left(\begin{array}{c|c} \overbrace{A'(g_\alpha)}^{m} & \overbrace{B(g_\alpha)}^{n-m} \\ \hline O & C(g_\alpha)\end{array}\right)\begin{array}{l}\}m\\ \}n-m\end{array} \tag{1.8.1}$$

称之为三角形矩阵. 这种矩阵保持子空间 W 内的向量在这种矩阵作用下仍为 W 空间中的向量，因为

$$A(g_\alpha)\begin{pmatrix} e_1\\ \vdots\\ e_m\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A'(g_\alpha) & B(g_\alpha)\\ O & C(g_\alpha)\end{pmatrix}\begin{pmatrix} e_1\\ \vdots\\ e_m\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1'\\ \vdots\\ e_m'\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}$$

$$e_k' = \sum_{i=1}^{m} a_{ki}'(g_\alpha)e_i,\quad k=1,2,\cdots,m$$

$a_{ki}'(g_\alpha)$ 为矩阵 $A'(g_\alpha)$ 的矩阵元.

也可从表示矩阵可以表示为三角形矩阵来定义可约表示，即如果存在一个相似变矩

阵 R，使全部表示矩阵 $A(g_\alpha)$ 变换为三角形矩阵，亦即

$$RA(g_\alpha)R^{-1} = \begin{pmatrix} A'(g_\alpha) & B(g_\alpha) \\ O & C(g_\alpha) \end{pmatrix} \tag{1.8.2}$$

则表示 A 是可约的. 实际上这两种定义是等价的. 表示空间 V 上的表示矩阵 $A(g_\alpha)$ 是由空间 V 中一组基矢 $e_1, \cdots, e_m, e_{m+1}, \cdots, e_n$ 给出的，变换 R 把这组基矢变为另一组基矢，$e_1', \cdots, e_m', e_{m+1}', \cdots, e_n'$ 在后面这组基矢中，前 m 个基矢张成一个子空间，如果表示矩阵是三角形矩阵，则这个子空间是群 G 的不变子空间，因为子空间的基矢 $e_1', e_2', \cdots, e_m', 0, \cdots, 0$ 在三角形矩阵变换下仍在此子空间内，即

$$A(g_\alpha)\begin{pmatrix} e_1' \\ e_2' \\ \vdots \\ e_m' \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A'(g_\alpha) & B(g_\alpha) \\ O & C(g_\alpha) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e_1' \\ \vdots \\ e_m' \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1'' \\ \vdots \\ e_m'' \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

如果表示空间 V 是群 G 两个不变子空间 V_1 和 V_2 的直和，即 $V = V_1 \oplus V_2$，群 G 在空间 V 上的表示是完全可约表示

定义 1.8.3 若表示空间 V 是两个不变子空间 V_1(m_1 维)和 V_2(m_2 维)的直和(direct sum)，即 $V = V_1 \oplus V_2$，则在空间 V 上群 G 的表示是完全可约的.

由于群 G 使 V_1 内的向量 x 和 V_2 内的向量 y 分别在子空间 V_1 和 V_2 内变化，因而完全可约表示具有准对角矩阵的形式，即

$$A(g_\alpha) = \begin{pmatrix} \overbrace{A_1(g_\alpha)}^{m_1} & \overbrace{O}^{m_2} \\ O & A_2(g_\alpha) \end{pmatrix}\begin{matrix} \}\, m_1 \\ \}\, m_2 \end{matrix} \tag{1.8.3}$$

显然完全可约表示是一种特殊的可约表示. 实际上只有在空间 V 中选择的基矢 $e_1, \cdots, e_{m_1}, e_{m_1+1}, \cdots, e_{m_1+m_2}$，其中 $e_1, \cdots, e_{m_1}$ 和 $e_{m_1+1}, \cdots, e_{m_1+m_2}$ 分别张成不变子空间 V_1 和 V_2 时，表示矩阵才具有准对角形式. 一般来讲，对于空间 V 中的任意基矢 $e_1, \cdots, e_n (n = m_1 + m_2)$ 表示矩阵并不一定具有准对角形式，而是存在一种变换 R，它可把基矢 $e_1, \cdots, e_n$ 变为 $e_1', \cdots, e_{m_1}', e_{m_1+1}', \cdots, e_{m_1+m_2}'$，使得 $e_1', \cdots, e_{m_1}'$ 和 $e_{m_1+1}', \cdots, e_{m_1+m_2}'$ 分别张成不变子空间 V_1 和 V_2，在这种基下的表示矩阵

$$RA(g_\alpha)R^{-1} = \begin{pmatrix} A_1(g_\alpha) & O \\ O & A_2(g_\alpha) \end{pmatrix}$$

才是准对角的.

如果群 G 在空间 V 上的表示是可约的，但并非完全可约，则称这种表示是可约而不完全可约.

只有准对角矩阵形式的矩阵可写为矩阵的直和，即

$$\begin{pmatrix} A_1(g_\alpha) & O \\ O & A_2(g_\alpha) \end{pmatrix} = A_1(g_\alpha) \oplus A_2(g_\alpha) = A(g_\alpha)$$

也就是说 m_1 维的矩阵 $A_1(g_\alpha)$ 与 m_2 维的矩阵 $A_2(g_\alpha)$ 的直和为 (m_1+m_2) 维的准对角矩阵，它的矩阵元为

$$a(g_\alpha)_{ij} = 0,\ \text{当}\ i > m_1,\ j \leqslant m_1\ \text{或}\ i \leqslant m_1,\ j > m_1$$

如果群 G 的表示空间 V 包括若干个不变子空间，即

$$V = \sum_p \oplus m_p V_p, \quad n = \sum_p m_p n_p \tag{1.8.4}$$

其中 n_p 为子空间 V_p 的维数，m_p 为 n_p 维的不变子空间在 V 中出现的次数，有时称为重复度. 此时群 G 的表示是可约的，而且在基矢选择为各个不变子空间基矢之和时，表示矩阵是准对角的，而且可写为

$$A(g_\alpha) = \sum_p \oplus m_p A_p(g_\alpha) \tag{1.8.5}$$

其中矩阵 $A_p(g_\alpha)$ 是 n_p 的矩阵.

下面给出不可约表示的定义.

定义 1.8.4　如果群 G 的表示空间 V 不存在群 G 的不变子空间，则称在这个表示空间上的表示是不可约表示或称既约表示.

显然不可约表示的表示矩阵不可能全部具有三角形矩阵的形式，更不能全部具有准对角的形式. 也可等价地定义为：如果群 G 的表示矩阵不可能通过相似变换全部变为三角形形式，则称这种表示为不可约表示或称既约表示.

群的表示可以有无穷多种，而在诸多相互等价的表示中只须研究其中 1 种，因而在表示理论中只研究各种不等价的表示. 而不等价表示又可分为可约表示与不可约表示，可约表示又可分解为不可约表示的直和，因而寻求表示中的不等价的不可约表示是群表示理论中的重要内容.

下面给出关于不可约表示的两个重要定理.

定理 1.8.1　群 G 在表示空间 V 中给出的酉表示如果是可约的，则一定是完全可约表示.

证明　酉表示是建立在内积空间中的保持向量模不变的表示，表示矩阵是酉矩阵. 如果酉表示是可约的，即 n 维表示空间 V 包括 m 维的不变子空间 W，因而 V 由不变子空间 W 和它的补空间 W' 构成. 因为是内积空间，可选择正交基矢，使 $(e_1, e_2, \cdots, e_m)$ 为子空间 W 的基矢，$(e_{m+1}, e_{m+2}, \cdots, e_n)$ 为补空间 W' 的基矢，因这两组基矢相互正交，所以子空间 W 中的向量与补空间 W' 中的向量正交. 称这种相互正交的补空间 W' 为子空间 W 的正交补空间. 若向量 $x \in W$，$y \in W'$，则 x 与 y 正交，它们的内积为零，即

$$(x, y) = 0$$

因为 $x \in W$，则

$$A(g_\alpha)x = x' \in W, \quad A(g_\alpha^{-1})x = x'' \in W,$$

因而

$$(A(g_\alpha)x, y) = 0$$

另一方面，按内积定义

$$(A(g_\alpha)x, y) = (x, A(g_\alpha)^+ y)$$

因而

$$(x, A(g_\alpha)^+ y) = 0$$

这表明

$$A(g_\alpha)^+ y \in W'$$

即 W' 也是 G 的不变子空间，因而线性空间 V 是直和空间，$V = W \oplus W'$，因此表示 A 是完全可约的.

由这个定理可得到一个重要推论，即

推论 有限维可约酉表示可分解为不可约表示的直和.

若表示是不可约的，当然谈不上分解，如果是可约的，根据上述定理则一定是完全可约的. 此时可约表示 A 可表示为

$$A(g_\alpha) = A_1(g_\alpha) \oplus A'(g_\alpha)$$

如果 $A'(g_\alpha)$ 还是可约的，它又可约化为直和，即

$$A'(g_\alpha) = A_2(g_\alpha) \oplus A''(g_\alpha)$$

其中 $A_2(g_\alpha)$ 是不可约表示. 若 $A''(g_\alpha)$ 还是可约表示，它又可做如上分解，直至把有限维表示空间分解完毕. 因而，有限维可约酉表示为

$$A(g_\alpha) = \sum_p m_p A_p(g_\alpha)$$

m_p 表示第 p 个不可约表示出现的重复度. 这个推论说明，荷载表示的内积空间，可分解为群的不可约表示空间的直和，表示的基矢分别张开各个不变子空间，而且所有基矢相互正交. 于是在这个空间上建立的酉表示为每个不变子空间中不可约表示的直和.

酉表示对于群论在量子力学中的应用是十分重要的. 因为 Hilbert 空间是完备的内积空间，量子力学中的波函数是 Hilbert 空间中的向量，而波函数的模表示微观粒子出现的几率，量子力学中有价值的变换应当是保持向量模不变的变换，因而也就是酉变换，由酉变换构成的群即酉群，在 Hilbert 空间中都表现为酉矩阵. 因而群论在量子力学中的应用主要体现为酉群和酉表示的问题.

1.9 有限群表示理论中的基本定理

有限群的表示理论，主要可归纳为下面的一些基本定理. 这些定理对有限群在各种学科中的应用有重要的意义，而其中的一些内容还可推广到连续群，主要是紧致李群之中.

定理 1.9.1 有限群 G 在内积空间中的任何表示都等价于酉表示.

证明 设矩阵群 $\{\bar{G}(g)\}$ 是有限群 $G\{g_1, \cdots, g_k\}$ 在某一内积空间上的非酉表示，由这些表示矩阵可定义一个厄米矩阵（所谓厄米矩阵即矩阵与它的厄米共轭相等），即

$$H = \sum_{g \in G} G(g)^+ G(g)$$

容易证明上述定义的矩阵 H 是厄米矩阵，事实上按此定义可得

$$H^+ = \sum_{g\in G}[G(g)^+ G(g)]^+ = \sum_{g\in G} G(g)^+ (G(g)^+)^+$$
$$= \sum_{g\in G} G(g)^+ G(g) = H$$

因而 H 是厄米矩阵.

厄米矩阵理论中可以证明，任一厄米矩阵都可由酉矩阵对角化，即

$$UHU^{-1} = UHU^+ = D$$

式中 U 为酉矩阵，D 为对角矩阵，即 D 的矩阵元 d_{ij} 为 $d_{ij} = \delta_{ij} d_i$. 矩阵 U 是使 H 对角化的变换矩阵.

由此得到

$$UHU^+ = \sum_{g\in G} UG^+(g)U^+ UG(g)U^+$$
$$= \sum_{g\in G} G'(g)^+ G'(g) = D$$

其中

$$G'(g) = UG(g)U^+$$
$$G'(g)^+ = (UG(g)U^+)^+ = UG^+(g)U^+$$

D 为对角矩阵，其矩阵元为

$$d_{ij} = \delta_{ij}\sum_k \sum_{g\in G} G'(g)^+_{ik} G'(g)_{kj} = \delta_{ij}\sum_k \sum_{g\in G} |G'(g)_{ki}|^2$$

由于表示矩阵 $G'(g)$ 是非奇矩阵，因而 $|d_{ii}|^2 > 0$，否则若 $d_{ii} = 0$，则要求 $\sum_k |G'(g)_{ki}|^2 = 0$，这表明矩阵 $G'(g)$ 第 i 列全部矩阵元都为 0，显然与 $G'(g)$ 是非奇矩阵相矛盾. 因而可定义 $D^{\frac{1}{2}}$ 矩阵，即 $D^{\frac{1}{2}}$ 矩阵的矩阵元为 $d_{ij}^{1/2} = \delta_{ij} d_i^{1/2}$，它的逆矩阵为 $D^{-\frac{1}{2}}$，矩阵元为 $d_{ij}^{-1/2} = \delta_{ij} d_i^{-1/2}$，它们都是厄米矩阵.

定义矩阵

$$X = D^{\frac{1}{2}}U,\quad X^{-1} = U^{-1}D^{-\frac{1}{2}} = U^+ D^{-\frac{1}{2}}$$

矩阵 X 可把表示矩阵变为酉矩阵，即

$$G''(g) = XG(g)X^{-1} = D^{\frac{1}{2}}UG(g)U^+ D^{-\frac{1}{2}} = D^{\frac{1}{2}}G'(g)D^{-\frac{1}{2}}$$

下面证明 $G''(g)$ 是酉矩阵.

按定义

$$G''(g)^+ G''(g) = D^{-\frac{1}{2}}G'(g)^+ D^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}G'(g)D^{-\frac{1}{2}}$$

在其中插入单位矩阵

$$D^{-\frac{1}{2}}DD^{-\frac{1}{2}} = E = \sum_{g\in G} D^{-\frac{1}{2}}G'(g)^+ G'(g)D^{-\frac{1}{2}}$$

得到

$$G''(g)^+ G''(g) = D^{-\frac{1}{2}}G'(g)^+ D^{\frac{1}{2}}ED^{\frac{1}{2}}G'(g)D^{-\frac{1}{2}}$$
$$= D^{-\frac{1}{2}}G'(g)^+ D^{\frac{1}{2}}\sum_{g'\in G} D^{-\frac{1}{2}}G'(g')^+ \cdot G'(g')D^{-\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}G'(g)D^{-\frac{1}{2}}$$
$$= \sum_{g'\in G} \oplus D^{-\frac{1}{2}}G'(g)^+ G'(g')^+ G'(g')G'(g)D^{-\frac{1}{2}}$$

根据表示矩阵乘积的关系

$$G'(g')G'(g) = G'(g'g)$$
$$G'(g)^{+}G'(g')^{+} = G'(g'g)^{+}$$

因而上式为

$$\begin{aligned} G''(g)^{+}G''(g) &= \sum_{g'\in G} D^{-1/2}G'(g'g)^{+}G'(g'g)D^{-1/2} \\ &= D^{-1/2}DD^{-1/2} \\ &= E \end{aligned}$$

这正是酉矩阵的定义，这就证明了这一定理（在得到上式中利用了群的重排定理）.

这个定理也可由另一个角度来证明，在内积空间中的非酉表示 $G(g)$，不能保持向量内积不变，即对表示空间中任意向量 x 与 y 的内积 (x, y)，在变换 $G(g)$ 之下，并不是不变的，亦即

$$(x, y) \neq (G(g)x, G(g)y)$$

现在重新定义内积 $\langle x, y\rangle$，它为

$$\langle x, y\rangle = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(G(g_i)x, G(g_i)y)$$

其中 n 为群 G 的阶. 显然新定义的内积保持向量模在 $G(g)$ 作用下不变，即

$$\begin{aligned} \langle G(g_j)x, G(g_j)x\rangle &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(G(g_j)G(g_i)x, G(g_j)G(g_i)x) \\ &= \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}(G(g_k)x, G(g_k)x) \\ &= \langle x, x\rangle \end{aligned}$$

在得到上式时也利用了群的重排定理，其中 $g_k = g_j g_i$

令 $(e_1, e_2, \cdots, e_n)$ 为原有内积 $(\quad,\quad)$ 的正交归一化基矢，而 $(f_1, f_2, \cdots, f_n)$ 为新的内积 $\langle\quad,\quad\rangle$ 的正交归一化基矢. 即

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij}, \quad \langle f_i, f_j\rangle = \delta_{ij}$$

这两组基矢间的变换为 X，即

$$\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix} = X\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix}$$

向量 x 在这两组基矢下为

$$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = (x_1', x_2', \cdots, x_n)\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}$$

则

$$Xx = (x_1, x_2, \cdots, x_n)X\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}$$

于是

$$\langle Xx, Xy \rangle = x_i^* y_i = (x, y)$$

利用这一关系可得到

$$\begin{aligned} &(X^{-1}G(g)Xx, X^{-1}G(g)Xy) \\ &= \langle XX^{-1}G(g)Xx, XX^{-1}G(g)Xy \rangle \\ &= \langle G(g)Xx, G(g)Xy \rangle \end{aligned}$$

由于 $G(g)$ 保持新定义的内积 $\langle\ ,\ \rangle$ 不变，因而

$$\langle G(g)Xx, G(g)Xy \rangle = \langle Xx, Xy \rangle = (x, y)$$

于是

$$(X^{-1}G(g)Xx, X^{-1}G(g)Xy) = (x, y)$$

因而经过变换后的变换

$$X^{-1}G(g)X = G'(g)$$

保持原来的内积不变，即 $G'(g) = X^{-1}G(g)X$ 是酉变换. 这是对上述定理从内积方面给出的证明.

这个定理的重要性在于有限群的非酉表示都可通过相似变换变为酉表示，即有限群的一切表示都与一个酉表示等价，因而只须讨论有限群的酉表示.

由这个定理和定理 1.8.1 可得到两个重要推论.

推论 (1) 有限群在内积空间的表示如果是可约的，则一定是完全可约的；

(2) 有限群在内积空间的表示或者是不可约的，或者可表示为若干不可约表示的直和.

如何判断表示是不可约的或可约的以及两个表示是否等价是表示理论中的重要问题，Schur 引理为此提供了一个判据.

定理 1.9.2(Schur 引理 1)　与群 G 的不可约表示 $\{G(g)\}$ 中全部矩阵相交换的矩阵一定是常数矩阵. 即，若 M 与群 G 中的全部表示矩阵 $G(g)$ 都可交换相乘，即

$$G(g)M = MG(g) \quad (g \in G) \tag{1.9.1}$$

则 M 一定为常数矩阵，即 $M = CE$，E 为单位矩阵.

证明　若不可约表示 $\{G(g)\}$ 是非酉表示，根据定理 1.9.1 可把它变换为酉表示，即存在一个酉矩阵 U，使

$$UG(g)U^+ = G'(g)$$

表示 $\{G'(g)\}$ 是酉表示. 若定理对酉表示成立，即

$$G'(g)M = MG'(g), \quad M = CE$$

则对非酉表示为

$$UG(g)U^+ M = MUG(g)U^+$$

上式两端分别乘以矩阵 U^+ 和 U 得到

$$U^+ UG(g)U^+ MU = U^+ MUG(g)U^+ U$$

即

$$G(g)U^+ MU = U^+ MUG(g)$$

这表明非酉表示 $\{G(g)\}$ 与矩阵 U^+MU 交换，如果 M 是常数矩阵，因而

$$U^+ MU = M$$

故 Schur 引理若对酉表示成立，则对非酉表示也成立，因而令不可约表示 $G(g)$ 为酉表示来证明，并不失于一般性.

假定 $\{G(g)\}$ 是不可约的酉表示，而且

$$G(g)M = MG(g) \tag{1.9.2}$$

两端取厄米共轭则为

$$[G(g)M]^+ = [MG(g)]^+ = M^+ G(g)^+ = G(g)^+ M^+$$

而 $G^+(g) = G(g^{-1})$，因而也就是说如果所有不可约表示矩阵都与矩阵 M 交换，一定也与 M^+ 交换. 令

$$H_+ = M + M^+ \text{ 或 } H_- = i(M - M^+) \tag{1.9.3}$$

H_+ 与 H_- 均为厄米矩阵，即 $H_\pm = H_\pm^+$，因而 $G(g)$ 也与 $H_\pm$ 交换，即

$$G(g)H_\pm = H_\pm G(g) \tag{1.9.4}$$

由于 $H_\pm$ 是厄米矩阵，它可由一个酉矩阵对角化，令使之对角化的矩阵为 $U_\pm$ ($U_\pm^+ = U_\pm^{-1}$)，即 $U_\pm H_\pm U_\pm^+ = D_\pm$，$D_\pm$ 为对角矩阵，把(1.9.4)式两端分别乘以 $U_\pm$ 和 $U_\pm^+$，中间插入 $U_\pm^+ U_\pm = E$，于是得到

$$U_\pm G(g)U_\pm^+ U_\pm H_\pm U_\pm^+ = U_\pm H_\pm U_\pm^+ U_\pm G(g)U_\pm^+$$

由此得到

$$G'_\pm(g)D_\pm = D_\pm G'(g) \tag{1.9.5}$$

$G'_\pm(g)$ 为

$$G'_\pm(g) = U_\pm G_\pm(g)U_\pm^+$$

仍然为酉矩阵，它与表示 $\{G(g)\}$ 等价. 对(1.9.5)取分量形式得到

$$\sum_k d_{ik}^\pm G'_\pm(g)_{kj} = \sum_k G'_\pm(g)_{ik} d_{kj}^\pm$$

由于 D 是对角矩阵，上式为

$$d_{ii}^\pm G'_\pm(g)_{ij} = G'_\pm(g)_{ij} d_{jj}^\pm \tag{1.9.5'}$$

这说明只有 H 对角化之后，存在相同的对角元 $d_{ii}^\pm = d_{jj}^\pm$，相应的 $G'_\pm(g)$ 的矩阵元 $G'_\pm(g)_{ij}$ 才不为 0，若 $d_{ii}^\pm \neq d_{jj}^\pm$，则 $G'_\pm(g)_{ij}$ 为 0.

假定对角矩阵 $D_\pm$ 中存在 p 个($p < n$，n 为表示的维数)与 $d_{11}^\pm$ 相同的矩阵元，即

$$d_{11}^\pm = d_{22}^\pm = \cdots = d_{pp}^\pm$$

其它对角元 $d_{p+1p+1}^\pm$，…，$d_{nn}^\pm$ 都与 $d_{11}^\pm$ 不相同，可经过一个酉变换，使对角矩阵 $D_\pm$ 具有形式

$$D_{\pm}=\begin{pmatrix} d_{11} & & & & & & \\ & d_{11} & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & d_{11} & & & \\ & & & & d_{p+1,\,p+1} & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & d_{nn} \end{pmatrix}$$

此时$\{G'_{\pm}(g)\}$也经历一个相同的相似变换，变为$\{G_{\pm}''(g)\}$，它仍然与$\{G(g)\}$等价. 于是可得到

$$G_{\pm}''(g)_{ij}=0 \quad 若\ i=1,2,\cdots,p,\quad j=p+1,p+2,\cdots,n$$
$$或\quad i=p+1,\cdots,n,\quad j<1,2,\cdots,p$$

这说明矩阵$G_{\pm}''(g)$具有准对角形式，从而$G_{\pm}''(g)$是可约的，这与$\{G(g)\}$（从而也是$\{G'(g)\}$和$\{G''(g)\}$）是不可表示的前题相矛盾. 因而$D_{\pm}$的对角元必须完全相同，即$D_{\pm}$为常数矩阵.

由于

$$D_{\pm}=U_{\pm}H_{\pm}U_{\pm}^{+},\quad H_{\pm}=U_{\pm}^{+}D_{\pm}U_{\pm}$$

$D_{\pm}$为常数矩阵，$D_{\pm}=d_{\pm}E$，E为单位矩阵，因而$H_{\pm}$也是常数矩阵，$H_{\pm}=D_{\pm}$，因而

$$M=\frac{1}{2}(H_{+}-iH_{-})=\frac{1}{2}(d_{+}E-id_{-}E)=\frac{1}{2}(d_{+}-id_{-})E$$

也是常数矩阵，这就证明了 Schur 引理.

Schur 引理的逆定理也是成立的，即

定理 1.9.3（Schur 引理 1 的逆定理）　若全部表示矩阵$\{G(g)\}$仅仅与常数矩阵交换，则表示$\{G(g)\}$一定是不可约的. 这里对逆定理就不进行证明了.

通过 Schur 引理 1 及其逆定理，我们得到一个判断表示是不是可约的一个依据，即不可约表示全部表示矩阵只与一个常数矩阵相交换，反之只与常数矩阵相交换的表示，一定是不可约的，即只与常数矩阵交换是不可约表示的充要条件.

定理 1.9.4（Schur 引理 2）　若对有限群的两个维数为n_1和n_2的不可约表示$\{A_1(g)\}$与$\{A_2(g)\}$，存在一个矩阵M，使

$$MA_1(g)=A_2(g)M$$

则矩阵M，当$n_1=n_2$时，只能为零矩阵（即M的矩阵元全部为 0）或$\det M\neq 0$的非零矩阵，当M为零矩阵时，不可约表示$\{A_1(g)\}$与$\{A_2(g)\}$不等价，当M为非零矩阵时，不可约表示$\{A_1(g)\}$与$\{A_2(g)\}$为等价表示. 当$n_1\neq n_2$时，M为零矩阵.

证明　这个定理只须证明$n_1=n_2$的情况，当$n_1\neq n_2$时，结论是显然的. 令不可约表示$\{A_1(g)\}$与$\{A_2(g)\}$均为酉表示（由于有限群的任一表示都等价于一个酉表示，因而从酉表示给出的证明并不失一般性），于是由

$$MA_1(g)=A_2(g)M \tag{1.9.6}$$

可得到

$$[MA_1(g)]^+ = [A_2(g)M]^+$$

即

$$A_1(g)^+ M^+ = M^+ A_1(g)^+ \text{ 或 } A_1(g^{-1})M^+ = M^+ A_2(g^{-1})$$

亦即

$$A_1(g)M^+ = M^+ A_2(g) \tag{1.9.7}$$

对(1.9.6)式两端左乘以 M^+ 得到

$$M^+ MA_1(g) = M^+ A_2(g)M$$

对(1.9.7)式两端右乘以 M，得到

$$A_1(g)M^+ M = M^+ A_2(g)M$$

于是得到

$$A_1(g)M^+ M = M^+MA_1(g)$$

由于 $A_1(g)$ 是不可约表示，由 Schur 引理 1 得到

$$M^+M = C, \quad C \text{ 为常数矩阵}$$

常数矩阵 C 的行列式为

$$\det C = \det M^+ \det M = a$$

a 为常数矩阵的对角元的 n 次方，若 $a \neq 0$，则 $\det M \neq 0$，存在逆矩阵 M^{-1}.

于是(1.9.6)式变为

$$A_1(g) = M^{-1}A_2(g)M$$

即表示 A_1 和 A_2 等价. 这说明当 M 为非零矩阵时，A_1 和 A_2 为等价表示，只有 M 为特殊的常数矩阵零矩阵($\det M = 0$)时，M 不存在逆，因而 A_1 与 A_2 是不等价的不可约表示.

若有限群 G，具有一系列不等价的不可约表示，这些表示的矩阵元之间存在一定的正交关系，这种关系可由广义正交定理给出，在 Schur 引理的基础上可证明这个定理.

定理 1.9.5(广义正交定理) 设 n 维有限群 G，有一系列不等价的不可约酉表示 $\{A^{(1)}(g)\}$，$\{A^{(2)}(g)\}$，…，$\{A^{(k)}(g)\}$，它们的维数分别为 m_1，m_2，…，m_k，则这些不可约表示的矩阵元之间存在正交关系，即

$$\sum_{g_\alpha \in G} A^{(i)}(g_\alpha)^*_{\mu\nu} A^{(j)}(g_\alpha)_{\mu'\nu'} = \frac{n}{m_i}\delta_{ij}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'} \tag{1.9.8}$$

证明 由任意的矩阵 D，通过不可约表示 $A^{(i)}(g)$ 和 $A^{(j)}(g)$ 构成一个矩阵 C，即

$$C = \frac{1}{n}\sum_\alpha A^{(i)}(g_\alpha)DA^{(j)}(g_\alpha^{-1})$$

以矩阵 $A^{(j)}(g_\beta)$ 右乘上式得到

$$CA^{(j)}(g_\beta) = \frac{1}{n}\sum_\alpha A^{(i)}(g_\alpha)DA^{(j)}(g_\alpha^{-1})A^{(j)}(g_\beta)$$

插入单位矩阵 $A^{(i)}(g_\beta)A^{(i)}(g_\beta^{-1})$，

$$CA^{(j)}(g_\beta) = \frac{1}{n}\sum_\alpha A^{(i)}(g_\beta)A^{(i)}(g_\beta^{-1}) \cdot A^{(i)}(g_\alpha)DA^{(j)}(g_\alpha^{-1})A^{(j)}(g_\beta)$$

若 $g_\beta^{-1}g_\alpha=g_\gamma$，则上式为

$$CA^{(j)}(g_\beta)=A^{(i)}(g_\beta)\frac{1}{n}\sum_\gamma A^{(i)}(g_\gamma)DA^{(i)}(g_\gamma)^{-1}$$
$$=A^{(i)}(g_\beta)C$$

由于表示 $A^{(i)}$ 和 $A^{(j)}$ 都是不可约表示，由 Schur 引理 2 知道，若表示 i 与 j 是不等价的(即 $i\neq j$)，则矩阵 C 为 0 矩阵；若表示 i 与 j 是等价的(即 $i=j$)，则矩阵 C 为常数矩阵，这个常数矩阵 C 由矩阵 D 决定，可记为 $C=\lambda(D)E$，E 为单位矩阵. 于是按定义有

$$C_{\mu\mu'}=\frac{1}{n}\sum_\alpha\sum_{kl}A^{(i)}(g_\alpha)_{\mu k}D_{kl}A^j(g_\alpha^{-1})_{l\mu'}$$
$$=\frac{1}{n}\sum_\alpha\sum_{kl}A^{(i)}(g_\alpha)_{\mu k}D_{kl}A^j(g_\alpha)^*_{\mu' l}=\delta_{ij}\delta_{\mu\mu'}\lambda(D)$$

这里利用了酉矩阵的性质，构造一个特殊的 D 矩阵，

$$D_{kl}=\delta_{k\nu}\delta_{l\nu'}$$

即只有一个矩阵元 $D_{\nu\nu'}=1$，其余全为 0. 利用这种矩阵上式为

$$C_{\mu\mu'}=\frac{1}{n}\sum_\alpha\sum_{kl}A^{(i)}(g_\alpha)_{\mu k}\delta_{k\nu}\delta_{l\nu'}A^j(g_\alpha)^*_{\mu' l}$$
$$=\frac{1}{n}\sum_\alpha A^{(i)}(g_\alpha)_{\mu\nu}A^{(j)}(g_\alpha)^*_{\mu'\nu'}=\delta_{ij}\delta_{\mu\mu'}\lambda(D)$$

另一方面在上式中取 $\mu'=\mu$，并对 μ 求和，可得到 $\lambda(D)$，即

$$\sum_\mu\frac{1}{n}\sum_\alpha A^{(i)}(g_\alpha)_{\mu\nu}A^{(i)}(g_\alpha^{-1})_{\nu'\mu}$$
$$=\frac{1}{n}\sum_\alpha A^{(i)}(g_\alpha^{-1}g_\alpha)_{\nu'\nu}=\delta_{\nu\nu'}=\delta_{ij}\lambda(D)m_i$$

m_i 为不可约表示 $A^{(i)}$ 的维数. 由此得到

$$\lambda(D)=\frac{1}{m_i}\delta_{\nu\nu'}$$

因而得到

$$\sum_\alpha A^{(i)}(g_\alpha)_{\mu\nu}A^{(j)}(g_\alpha)^*_{\mu\nu'}=\delta_{ij}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}\frac{n}{m_i}$$

此即广义正交定理(great orthogonelity theorem)，在下节中将进一步看到正交性的意义.

1.10　群的特征标

1.10.1　特征标及其基本性质

一个群在表示空间上的表示矩阵与表示空间的基矢选择有关，不同基矢得到相互等价的不同的表示矩阵. 然而，矩阵的迹是矩阵的一个不变量，它与基矢选择无关，所谓矩阵的迹即矩阵的对角元之和，记为

$$\mathrm{tr}A=\sum_i A_{ii}\qquad(1.10.1)$$

显然若 $A'=UAU^{-1}$，U 为酉矩阵，则

$$\mathrm{tr}A' = \mathrm{tr}(UAU^{-1}) = \sum_i (UAU^{-1})_{ii} = \sum_i \sum_{kl} U_{ik}A_{kl}U_{li}^{-1}$$

而

$$\sum_i U_{li}^{-1}U_{ik} = \delta_{lk}$$

因而

$$\mathrm{tr}A' = \mathrm{tr}(UAU^{-1}) = \mathrm{tr}A \tag{1.10.2}$$

这表明矩阵的迹对表示理论是一个重要的不变量．在群论中，全部表示矩阵的迹称为这个表示的特征标.

定义 1.10.1 若矩阵集合$\{A(g_i)\}$是群 $G=\{g_0, g_1, \cdots,\}$ 的表示，把表示矩阵的迹，记为$\chi(g_i)$，即

$$\chi(g_\alpha) = \mathrm{tr}A(g_\alpha) = \sum_i A_{ii}(g_\alpha) \tag{1.10.3}$$

一个表示的全部表示矩阵的迹$\{\chi(g_1), \chi(g_2), \cdots, \chi(g_n)\}$称为这个表示的特征标．其中$\chi(g_i)$为特征标的一个分量.

显然特征标具有以下三个性质，即

(1) 等价表示具有相同的特征标，若表示 A'与 A 是等价表示，即 $A'=UAU^{-1}$，则

$$\chi(A) = \chi(A') \tag{1.10.4}$$

(2) 在一个表示中，同一共轭类的群元素的表示矩阵有相同的特征标．群 G 中与元素 g_α 同一共轭类的元素为 $g_ig_\alpha g_i^{-1}$，$g_i \in G$．于是同一类的元素的特征标相同，即

$$\chi(g_\alpha) = \chi(g_ig_\alpha g_i^{-1}) \tag{1.10.5}$$

这表明表示的特征标是类的函数．因而一个表示的特征标有 m 个分量，m 为群中类的数目.

(3) 单位元 e 特征标等于表示的维数 m，即

$$\chi(e) = m \tag{1.10.6}$$

这些性质对所有群都是正确的.

1.10.2 有限群特征标的基本定理

下面讨论有限群特征标的一些基本定理.

定理 1.10.1(特征标第一正交性质) 若有限群 G 存在 k 个不等价不可约表示 $A^{(1)}$，$A^{(2)}$，$\cdots$，$A^{(k)}$，它们的维数为 m_1，m_2，$\cdots$，m_k．则不可约表示的特征标之间存在如下的正交关系，即

$$\frac{1}{n}\sum_{g_\alpha \in G}\chi^{(p)}(g_\alpha)^*\chi^q(g_\alpha) = \frac{1}{n}\sum_{c_i} n_i\chi^{(p)}(c_i)^*\chi^q(c_i) = \delta_{pq}$$

其中 c_i 为群的类，n_i 为 c_i 类中的元表数目.

证明 由广义正交定理得

$$\frac{1}{n}\sum_{g_\alpha \in G}A_{\mu\nu}^{(p)}(g_\alpha)^*A_{\mu'\nu'}^{(q)}(g_\alpha) = \frac{1}{m_p}\delta_{pq}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}$$

取 $\mu=\nu$，$\mu'=\nu'$，则为

$$\frac{1}{n}\sum_{g_\alpha\in G}A_{\mu\mu}^{(p)}(g_\alpha)^*A_{\mu'\mu'}^{(q)}(g_\alpha)=\frac{1}{m_p}\delta_{pq}\delta_{\mu\mu'}\tag{1.10.7}$$

在上式中对μ和μ'进行求和，得到

$$\frac{1}{n}\sum_{g_\alpha\in G}\sum_{\mu,\mu'}A_{\mu\mu}^{(p)}(g_\alpha)^*A_{\mu'\mu'}^{(q)}(g_\alpha)=\frac{1}{m_p}\delta_{pq}m_p=\delta_{pq}$$

由此得到

$$\frac{1}{n}\sum_{g_\alpha\in G}\chi^{(p)}(g_\alpha)^*\chi^{(q)}(g_\alpha)=\frac{1}{n}\sum_{c_i}n_i\chi^{(p)}(c_i)^*\chi^{q}(c_i)=\delta_{pq}\tag{1.10.8}$$

这就证明了特征标的第一正交性质.

一切可约酉表示都可以约化为不可约表示的直和，即

$$A(g)=\sum_\nu\oplus m_\nu A^{(\nu)}(g)$$

可约表示$A(g)$的特征标

$$\chi^{(A)}(g)=\sum_\nu m_\nu\chi^{(\nu)}(g)$$

因而

$$\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(A)}(g)^*\chi^{(A)}(g)=\sum_\nu m\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(\nu)}(g)^*\chi^{(\nu)}(g)=\sum_\nu m_\nu>1$$

也就是从定理1.10.1得到

$$\frac{1}{n}\sum_g\chi(g)^*\chi(g)\geqslant 1\tag{1.10.9}$$

由此可判断表示是可约的还是不可约的：如果大于1，则为可约表示；如果等于1，则为不可约表示.

可约表示$D^{(A)}(g)$可分解为不可约表示$D^{(\nu)}$的直和

$$D^{(A)}(g)=\sum_\nu m_\nu D^{(\nu)}(g)$$

由(1.10.8)式可得到可约表示$D^{(A)}$向不可约表示分解时不可约表示$D^{(\nu)}$出现的重复度m_ν的表达式，即

$$m_\nu=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(\nu)*}(g)\chi^{(A)}(g)\tag{1.10.10}$$

前面已经指出等价表示一定具有相同的特征标，下面证明群G的两个表示M和M'，如果它们有相同的特征标，它们一定是等价表示. 不失于一般性，令表示M和M'是酉表示，它们如果是可约的，一定是完全可约的，并且表示为不可约表示的直和，即

$$UMU^{-1}=\sum_\nu\oplus a_\nu A^{(\nu)}\tag{1.10.11}$$

因而特征标为

$$\chi(g)=\sum_\nu a_\nu\chi^{(\nu)}(g),\quad a_\nu=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi(g)^*\chi^{\nu}(g)\tag{1.10.12}$$

同样对表示M'有

$$U'M'U'^{-1}=\sum_\nu\oplus a'_\nu A^{(\nu)}$$

而且

$$\chi' = \sum_{\nu} a'_{\nu}\chi^{\nu}, \quad a'_{\nu} = \frac{1}{n}\sum_{g}\chi'(g)^{*}\chi^{\nu}(g) \tag{1.10.12'}$$

由于表示 M 和 M' 有相同的特征标，即 χ 与 χ' 相同，因而 $a'_{\nu} = a_{\nu}$，即具有相同特征标的两个可约表示 M 与 M' 的不可约表示分解有完全相同的形式，因而它们是等价表示.

把上面关于等价表示具有相同特征标和特征标相同的两个表示一定是等价表示归纳起来，就得到了下面的定理.

定理 1.10.2 有限群 G 的两个表示是等价表示的充分必要条件是它们的特征标相同.

1.11 群空间与群代数

1.11.1 群空间与群代数的定义

1. 群空间

在 1.5 节中已定义了线性空间，如果对于群 G 的元素 g_i 和 g_j 之间定义一种加法和群元素与数域 **C** 上的数的乘法，于是可得到

$$x = \sum_{i} x_i g_i, \quad x_i \in C, \ g_i \in G$$

$$y = \sum_{i} y_i g_i, \quad y_i \in C, \ g_i \in G$$

如果它们满足线性条件，即

$$x + y = \sum_{i}(x_i + y_i)g_i, \quad ax = \sum_{i}(ax_i)g_i$$

则 $x = \sum_{i} x_i g_i$ 的全体构成一个线性空间，称为群空间，记为 V_G. n 阶群 G 的 n 个群元素 g_i，$i = 1, 2, \cdots, n$ 构成群空间的基矢，称为自然基，称空间 V_G 中的元素 x 为向量.

任何一个抽象群都与 n 维复空间中的一般线性变换群 $GL(n, \mathbf{C})$ 的某一个子群同构，而一切线性变换在空间选定基矢后，都表现为矩阵，因而 $GL(n, \mathbf{C})$ 的一切子群都是满足一定条件的矩阵群，而矩阵之间的加法和矩阵与数的乘法都是有定义的，因而群空间的加法和数乘就是矩阵间的加法和数乘.

2. 群代数

定义 1.11.1 对于数域 **C** 上的线性空间 V，定义向量间的乘法，并满足下面的条件：

(1) 若 $x, y \in V$，则 $xy \in V$（V 对乘法的封闭性），

(2) $x(y + z) = xy + xz$，

(3) 若 $a \in C$，则 $a(xy) = (ax)y = xay$，

则称线性空间 V 为线性代数 V. 如果线性代数中的乘法符合结合律，则称这种线性代数为结合代数.

群是定义有乘法的元素集合，而且群的乘法遵循结合律. 因而定义有群元素间的加法和群元素与数域 **C** 上的数间的乘法的群空间，就是一个代数，称这个代数为群代数，

记为 R_G.

3. *群 G 在群空间 V_G(或群代数 R_G)上的表示——正则表示*

以群空间 V_G 作为群 G 的表示空间，可以得到群 G 的一个 n 维表示，这个表示称为正则表示(reguler representation). 正则表示实质上是定义一种映射，把每一个群元素 g_i 映射为群空间上的一个向量. 由于群空间 V_G 的自然基为群元素 g_j，因而也就是按一定规则把群元素 g_i 映射为群空间的一个基矢 g_j. 映射为 $\hat{P}(g_j)$，在 $\hat{P}(g_j)$ 的作用下，使 $g_k \Rightarrow g_l$. 定义映射规则为群的乘法规则，即

$$\hat{P}(g)g_j = gg_j = g_k \tag{1.11.1}$$

从理论上看等号左边为映射(即线性变换) $\hat{P}(g_j)$ 对群空间基矢 g_j 的作用，等号右边为映射的结果，这里 g_j，g_k 都是群空间 V_G 中的向量(基矢). 按表示的定义 1.11.1 式为

$$\hat{P}(g)g_j = \sum_k D^{(\gamma)}(g)_{kj}g_k \tag{1.11.2}$$

其中 $D^{(\gamma)}(g_i)$ 为正则表示关于群元素 g_i 的表示矩阵. 根据群的乘法规则，容易得到正则表示的表示矩阵为

$$D^{(\gamma)}(g)_{kj} = \begin{cases} 1, & gg_j = g_k \\ 0, & gg_j \neq g_k \end{cases} \tag{1.11.3}$$

从(1.11.3)式可看到正则表示的表示矩阵 $D^{(\gamma)}(g)$ 一行上只有一个 l，其余全部为 0，每一列上也只有一个 1，其余全部为 0. 因为在群元素乘法中，只有 $eg_i = g_i$，因而只有单位元 e 的正则表示的表示矩阵为对角元全部为 1 的单位矩阵，其它非单位元的表示矩阵因为 $gg_i \neq g_i (g \neq e)$，因而对角元全部为零. 由此得到，正则表示的特征标为

$$\chi^{(\gamma)}(e) = n, \quad \chi^{(\gamma)}(g) = 0, \quad g \neq e, g \in G$$

下面以 D_3 群为例给出它的正则表示.

令 D_3 群的元素为 $g_1 = e$，$g_2 = R_z(\frac{2\pi}{3})$，$g_3 = R_z(\frac{4\pi}{3})$，$g_4 = C_1(\pi)$，$g_5 = C_2(\pi)$，$g_6 = C_3(\pi)$. 由于 $g_1 g_\mu = g_\mu$，由(1.11.3)式得到 g_1 的正则表示矩阵为

$$D^{(\gamma)}(g_1)_{\mu\nu} = \begin{cases} 1, & \text{当}\mu = \nu \\ 0, & \text{当}\mu \neq \nu \end{cases}$$

$D^{(\gamma)}(g_1)$ 为 6 维的单位矩阵. 对于 g_2，由乘法表得到 $g_2g_1 = g_2$，$g_2g_2 = g_3$，$g_2g_3 = g_1$，$g_2g_4 = g_6$，$g_2g_5 = g_4$，$g_2g_6 = g_5$，因此 $D^{(\gamma)}(g_2)$ 的矩阵元由(1.11.3)式得到

$$D^{(\gamma)}(g_2)_{12} = D^{(\gamma)}(g_2)_{23} = D^{(\gamma)}(g_2)_{31} = D^{(\gamma)}(g_2)_{46} = D^{(\gamma)}(g_2)_{54} = D^{(\gamma)}(g_2)_{65} = 1$$

其余为 0，即

$$D^{(\gamma)}(g_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

对于 g_3 乘法表给出 $g_3g_1=g_3$，$g_3g_3=g_2$，$g_3g_2=g_1$，$g_3g_4=g_5$，$g_3g_5=g_6$，$g_3g_6=g_4$，因而正则表示矩阵为

$$D^{(\gamma)}(g_3)=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&1\\0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\end{pmatrix}$$

由 $g_4g_1=g_4$，$g_4g_2=g_5$，$g_4g_3=g_6$，$g_4g_4=g_1$，$g_4g_5=g_2$，$g_4g_6=g_3$ 可得到

$$D^{(\gamma)}(g_4)=\begin{pmatrix}0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1\\1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\end{pmatrix}$$

由 $g_5g_1=g_5$，$g_5g_2=g_6$，$g_5g_3=g_4$，$g_5g_4=g_3$，$g_5g_5=g_1$，$g_5g_6=g_2$ 得到

$$D^{(\gamma)}(g_5)=\begin{pmatrix}0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1\\0&0&0&1&0&0\\0&0&1&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\end{pmatrix}$$

由 $g_6g_1=g_6$，$g_6g_2=g_4$，$g_6g_3=g_5$，$g_6g_4=g_2$，$g_6g_5=g_3$，$g_6g_6=g_1$ 得到

$$D^{(L)}(g_6)=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&1\\0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\end{pmatrix}$$

由于正则表示是 n 维的，显然它是可约表示，下面讨论它的约化问题.

令经过酉矩阵 U 把正则表示 L 约化为不可约表示的直和，即

$$UD^{(L)}U^{-1}=\sum_{\gamma}\oplus a_{\gamma}A^{(\gamma)} \tag{1.11.4}$$

$A^{(\gamma)}$ 为不可约表示，$D^{(L)}$ 的特征标为

$$\chi^{(L)}(g)=\sum_{\gamma}a_{\gamma}\chi^{(\gamma)}(g) \tag{1.11.5}$$

由(1.10.10)式可得到(1.11.5)，式中的不可约表示 $A^{(\gamma)}$ 在正则表示中出现的重复度为

$$a_{\gamma}=\frac{1}{n}nd(\gamma)=d(\gamma) \tag{1.11.6}$$

$d(\gamma)$为不可约表示 $A^{(\gamma)}$ 的维数.

因而正则表示可分解为群 G 所包括的全部不可约表示的直和，而且每个不可约表示在正则表示中出现 $d(\gamma)$次，即

$$UD^{(L)}U^{-1} = \sum_{\gamma} \oplus d(\gamma)A^{(\gamma)}$$

由这个结果可得$\sum_{\gamma} d(\gamma)^2 = n$，即全部不可约表示维数平方和等于群的阶数.

正则表示的重要性就在于它包括了群的全部不等价不可约表示.

上面定义的正则表示为左正则表示，也可以定义右正则表示，即令

$$\hat{P}(g_i)g_j = g_j g_i \tag{1.11.7}$$

一般只讨论左(或右)正则表示一种就可以了.

上边给出的 D_3 群 6 维正则表示，可约化为三个不可约表示的直和，即

$$L = A_1 \oplus A_2 \oplus 2E$$

1.11.2　群函数与函数空间

1. *群函数*

群代数 R_G 中的任一向量 x 可写为

$$x = \sum_i x_i g_i$$

而且向量 x 在基 g_i 上的坐标 x_i，可以看成是群元素 g_i 的函数，即

$$x = \sum_i x(g_i)g_i$$

称这种函数 $x(g_i)$为群函数，群函数的定义域为群 G，值域为数域 **C**. 群函数满足条件

$$\begin{cases} (ax)(g_i) = ax(g_i) \\ (x+y)(g_i) = x(g_i) + y(g_i) \\ (xy)(g_i) = \sum_j x(g_i)y(g_j^{-1}g_i) \end{cases} \tag{1.11.8}$$

定义在群空间 V_G(或群代数 R_G)上的全部复函数构成了一个复函数空间，它是 n 维的函数空间，n 为群 G 的阶.

函数空间的 n 个基函数可选为

$$g_1(g_i) = \delta_{i1},\quad g_2(g_i) = \delta_{i2},\cdots,g_n(g_i) = \delta_{in}$$

基函数 $g_k(g_i) = \delta_{ki}$的定义是明确的，它表明第 k 个基函数 $g_k(g)$，当自变量 g 取 g_k 时，它的函数值为 1，g 取其它 $g_l(l\neq k)$时，函数值为 0.

定义群函数空间的任意两个函数 x 和 y 的内积为

$$(x, y) = \frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi(g)^* y(g) \tag{1.11.9}$$

如果$(x, y) = 0$，则称向量 x 与 y 相互正交.

2. *群的表示矩阵的矩阵元为群函数*

群 G 的任何一个 m 维表示，给出 n 个 $m\times m$ 的表示矩阵 $D(g)$，每个矩阵有 m^2 个矩阵元 $D(g)_{ij}$，显然每个矩阵元 $D(g)_{ij}$都是一个群函数，这些群函数的内积定义为

$$(D_{ij}, D_{kl}) = \frac{1}{n}\sum_{g\in G} D_{ij}(g)^* D_{kl}(g)$$

对于 m_ν 维不可约表示 $D^{(\nu)}$，给出的 m_ν^2 个群函数，由广义正交定理 1.9.8 得到

$$(D_{ij}^{(\nu)}, D_{kl}^{(\mu)}) = \frac{1}{n}\sum_{g\in G} D^{(\nu)}(g)_{ij}^* D^{(\mu)}(g)_{kl} = \frac{1}{m_\nu}\delta_{\mu\nu}\delta_{ik}\delta_{jl} \qquad (1.11.10)$$

即不同不可约表示所定义的群函数是相互正交，相同不可约表示表示不同矩阵元所构成的群函数是相互正交的，这就是称定理 1.9.5 为广义正交定理的原因.

群函数空间是 n 维空间，因而在这个空间中只存在 n 个线性无关的函数. 而所有不等价不可约表示给出的群函数是相互正交的，因而有限群的不等价不可约表示一定是有限的. 如果有 k 个不等价不可约表示，它们的维数为 m_i，$i=1, 2, \cdots, k$. 由全部不等价不可约表示的表示矩阵给出的相互正交的群函数总的数目为 $\sum_{i=1}^{k} m_i^2$，因而 $\sum_i m_i^2 \leqslant n$，而在上节中已得到 $\sum_i m_i^2 = n$.

3. *群函数空间的完备性定理*

前面已经指出 n 阶有限群全部不可约表示维数的平方和为 $\sum_i m_i^2 = n$. 也就是说由有限群全部不等价不可约表示矩阵的矩阵元给出的相互正交的群函数构成了 n 维群函数空间的正交基矢. 由这 $\sum_i m_i^2 = n$ 个正交基函数张开了整个群函数空间. 由全部不等价不可约表示给出的群函数对群函数空间是完备的. 下面给出并从另一个角度证明这个完备性定理.

定理 1.11.1(群函数空间的完备性定理) 设 n 阶有限群 G 有 k 个不等价不可约酉表示 $D^{(\nu_i)}$ $(i=1, 2, \cdots, k)$，它们的维数分别为 m_i. 由它们的表示矩阵的矩阵元 $D^{(\nu_i)}(g)_{kl}$给出的 $\sum_i m_i^2$ 个群函数在群函数空间中是完备的.

证明 由不可约表示的广义正交定理，亦即(1.11.10)式，说明这些群函数 $D^{(\nu_i)}(g)_{kl}$是相互正交的，因而它们构成一个 $\sum_i m_i^2$ 维的空间 V，V 是群空间 V_G 的子空间 $V\subset V_G$. 这个子空间对群 G 是不变子空间，即

$$\hat{P}(g')D^{(\nu_i)}(g)_{kl} = D^{(\nu_i)}(g'^{-1}g)_{kl} = D^{(\nu_i)}(g'')_{kl} \in V$$

因而群空间 $V_G = V\oplus V'$，V'为空间 V_G 中 V 的补空间.

而在群函数空间上建立的群 G 的表示为 n 维正则表示，它可经过相似变换把它变为酉表示，酉表示如果是可约的，则酉表示就是完全可约的. 因而补空间 V'也是群 G 的不变子空间，因而这个子空间还可约化为荷载不可约表示的不变子空间，然而在 V 中已包括了全部不可约表示，因而补空间 V'只能是零空间，这就证明了本定理.

由完备性定理 1.11.1 可得到下面的一个重要的推论.

定理 1.11.2(Burside 定理) n 阶有限群所有不可约表示的维数平方之和等于群的阶数，即 $\sum_i m_i^2 = n$.

1.11.3　类空间与类函数空间

1. 类空间和类函数

在群中定义了群元素间的加法和数乘之后得到了群空间 V_G，以群乘法为群空间的乘法，则群空间 V_G 就成了群代数 R_G. 如果在群空间 V_G 中，以群 G 的共轭类中的元素集合为空间基矢，仍然用群空间的加法和数乘作为这个空间的加法和数乘，就构成了一个新的线性空间，称为类空间. 群 G 如果包括 k 个共轭类，每个类为一个群元素的集合，这个集合为 $\{g_i | g_i = g_l g_k g_l^{-1},\ g_l \in G\}$，$k$ 个共轭类记为 C_i，$i=1, 2, \cdots, k$，通常 $C_1 = \{e\}$，即任何群单位元 e 都自己构成一个类.

在群函数中有一种特殊的函数，它们对于同一类的群元素有相同的函数值，即

$$f(g_i) = f(g_j g_i g_j^{-1})$$

实际上这是定义在类空间上的函数，称为类函数，可记为 $f(c_i)$，c_i 为群 G 的类，也就是类空间的基矢.

全部类函数构成的函数空间称为类函数空间.

对类函数 f 和 f' 可定义它们的内积为

$$(f, f') = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{k} n_i f(c_i)^* f'(c_i) = \frac{1}{n}\sum_{g\in G} f(g)^* f'(g) \tag{1.11.11}$$

其中 n_i 为类 c_i 中的元素数目.

群的特征标是类函数. 群 G 的任何一个表示 D 的特征标都存在关系.

$$\begin{aligned}\chi(g_k g_i g_k^{-1}) &= \mathrm{tr}D(g_k g_i g_k^{-1}) = \mathrm{tr}[D(g_k)D(g_i)D(g_k^{-1})] \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma} D(g_k)_{\alpha\beta} D(g_i)_{\beta\gamma} D(g_k^{-1})_{\gamma\alpha} = \sum_{\beta\gamma} \delta_{\beta\gamma} D(g_i)_{\beta\gamma} = \mathrm{tr}D(g_i) = \chi(g_i)\end{aligned}$$

因而两个表示的特征标 χ 与 χ' 的内积为

$$(\chi, \chi') = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{k} n_i \chi^*(c_i)\chi'(c_i) = \frac{1}{n}\sum_{g\in G} \chi^*(g)\chi'(g)$$

对于不可约表示，由特征标的第一正交性质得到

$$(\chi^{(\nu)}, \chi^{(\mu)}) = \delta_{\mu\nu}$$

这表明不可约表示特征标作为类函数它们是正交的.

2. 类函数空间的完备性

如果群 G 有 l 个不等价不可约表示，则得到 l 个特征标，它们为类函数空间提供了 l 个相互正交的基矢，下面可证明这 l 个基矢对类函数空间是完备的，也就是所有类函数都可表示为这组基矢的线性组合.

定理 1.11.3　若群 G 存在 l 个不等价的不可约表示，则 l 个特征标 $\chi^{(p)}(C_i)$ $(p=1, 2, \cdots, l)$ 构成类空间上的一个完备的基矢.

证明　任何一个类函数 $f(c_i)$ 同时也是群函数，它有性质

$$f(c_i) = f(g_i) = f(g_\alpha g_i g_\alpha^{-1})$$

因而

$$f(c_i) = \frac{1}{n_i}\sum_{g_\alpha\in G} f(g_\alpha g_i g_\alpha^{-1})$$

其中 n_i 是类 c_i 中的元素数，把$f(g_\alpha g_i g_\alpha^{-1})$在群函数空间展开为

$$f(g_\alpha g_i g_\alpha^{-1}) = \sum_{\gamma\mu\nu} a_{\mu\nu}^{(\gamma)} D_{\mu\nu}^{(\gamma)}(g_\alpha g_i g_\alpha^{-1})$$

$$= \sum_{\gamma\mu} \sum_{\nu\tau\delta} a_{\mu\nu}^{(\gamma)} D_{\mu\tau}^{(\gamma)}(g_\alpha) D_{\tau\delta}^{(\gamma)}(g_i) D_{\delta\nu}^{(\gamma)}(g_\alpha^{-1})$$

其中 $D_{\mu\nu}^{(\gamma)}(g)$为不可约表示(γ)的矩阵元. 于是

$$f(c_i) = \frac{1}{n}\sum_{g_\alpha \in G}\sum_{\gamma\mu\nu\tau\delta} a_{\mu\nu}^{(\gamma)} D_{\mu\tau}^{(\gamma)}(g_\alpha) D_{\delta\nu}^{\gamma}(g_\alpha^{-1}) D_{\tau\delta}^{(\gamma)}(g_i)$$

由不可约表示的正交定理得到

$$\frac{1}{n}\sum_{g_\alpha \in G} D_{\mu\tau}^{(\gamma)}(g_\alpha) D_{\delta\nu}^{(\gamma)}(g_\alpha^{-1}) = \frac{1}{n}\sum_{g_\alpha \in G} D_{\nu\delta}^{(\gamma)}(g_\alpha)^* D_{\mu\tau}^{(\gamma)}(g_\alpha) = \delta_{\nu\mu}\delta_{\delta\tau}$$

于是

$$f(c_i) = \sum_{\gamma\mu\nu\delta\tau} a_{\mu\nu}^{(\gamma)} D_{\tau\delta}^{(\gamma)}(g_i)\delta_{\nu\mu}\delta_{\delta\tau} = \sum_{\gamma\mu\delta} a_{\mu\mu}^{(\gamma)} D_{\delta\delta}^{(\gamma)}(g_i) = \sum_{\gamma} a^{(\gamma)}\chi^{(\gamma)}(c_i)$$

其中

$$a^{(\gamma)} = \sum_{\mu} a_{\mu\mu}^{(\gamma)}$$

因为$f(c_i)$是任意类函数，这就证明了全部不等价不可约表示在类空间上是完备的.

相互正交的 l 个不等价不可约表示的特征标是类空间的完备基矢，也可从另一方面看到. 群函数空间的完备基矢是全部不等价不可约表示的矩阵元，即$\{D_{\mu\nu}^{(\gamma)}(g)\}$，现在定义类矩阵，即

$$D^{(\gamma)}(c_i) = \sum_{g \in C_i} D^{(\gamma)}(g)$$

可以看到

$$D^{(\gamma)}(g_\alpha) D^{(\gamma)}(c_i) D^{(\gamma)}(g_\alpha^{-1}) = \sum_{g \in C_i} D^{(\gamma)}(g_\alpha g g_\alpha^{-1}) = D^{(\gamma)}(c_i)$$

因此可见类矩阵 $D^{(\gamma)}(c_i)$ 与不可约表示 $D^{(\gamma)}$ 的所有矩阵都交换，根据 Schur 引理，$D^{(\gamma)}(c_i)$为一常数矩阵，即

$$D^{(\gamma)}(c_i) = \lambda_i E$$

由此得到

$$D_{\mu\nu}^{(\gamma)}(c_i) = \begin{cases} 0, & 若\mu \neq \nu \\ \lambda_i, & 若\mu = \nu \end{cases}$$

当$\mu=\nu$时，

$$D_{\mu\mu}^{(\gamma)}(c_i) = \sum_{g \in C_i} D_{\mu\mu}^{(\gamma)}(g) = n_i\chi^{(\gamma)}(c_i)$$

因而 $\lambda_i m_\nu = n_i\chi^{(\gamma)}(C_i)$，$n_i$ 为类 C_i 中元素数. 因而当把 n 个群函数空间的基矢 $D_{\mu\nu}^{(\gamma)}(g)$ 收缩为类空间的基矢时，由于非对角元为零，而只剩下 l 个对角元，即特征标. 因而全部不等价不可约表示的特征标在类空间上是完备的.

由于类空间的维数等于群所包括的类的数目，因而由完备性定理可得到一个重要的推论，即

推论 若群 G 包括 l 个共轭元素类，能而且只能有 l 个不等价的不可约表示.

根据上节给出的全部不可约表示维数的平方和等于群的阶，立即得到

$$\sum_{\gamma=1}^{l} m_\gamma^2 = n \tag{1.11.12}$$

m_γ 为不可约表示 γ 的维数，l 为类的数目.

3. 特征标表与特征标的第二正交性质

由于类的数目 l 与不等价不可约表示数目相同，因而对包括 l 类的群 G，全部不可约表示特征标$\chi^{(\gamma)}(c_i)$构成一个 ll 的矩阵. 一般用不可约表示(γ)标记它的行，用类(i)标记它的列，这个矩阵就构成了特征标表.

特征标的第一正交性质表示了矩阵$\chi^{(\gamma)}(c_i)$行向量是相互正交的，下面证明它的列向量也是相互正交的.

定理 1.11.4(特征标的第二正交性质)　有限群 l 个不等价不可约表示的特征标满足以下的正交关系，即

$$\frac{1}{n}\sum_{\gamma=1}^{l} n_i\chi^{(\gamma)}(C_i)\chi^{(\nu)}(c_j) = \delta_{ij} \tag{1.11.13}$$

证明　为了证明这个定理，定义矩阵 F，令

$$F_{\gamma i} = \sqrt{\frac{n_i}{n}}\chi^{(\gamma)}(C_i)$$

它的厄米共轭 F^+ 的矩阵元

$$(F^+)_{\gamma i} = F_{\gamma i}^* = \sqrt{\frac{n_i}{n}}\chi^{(\gamma)}(C_i)^*$$

特征标的第一正交性质

$$\sum_i \frac{n_i}{n}\chi^{(\gamma)}(C_i)^*\chi^{(\delta)}(C_i) = \delta_{\gamma\delta}$$

使矩阵 F 具有性质

$$\sum_i F_{\delta i}F_{\gamma i}^* = (FF^+)_{\delta\gamma} = \delta_{\delta\gamma}$$

即

$$FF^+ = E$$

因此

$$\det(FF^+) = \det F\det F^+ = |\det F|^2 = \det E = 1$$

这说明 F 为非奇异矩阵，因而 F 存在逆矩阵 F^{-1}，而且逆矩阵为 F^+(因为 $FF^+=E$，左乘 F^{-1}，得到 $F^{-1}FF^+=F^+=F^{-1}$.)从而证明 F 为酉矩阵，于是

$$\begin{aligned}(F^+F)_{ij} &= \sum_k F_{ik}^+F_{kj} = \sum_k F_{ki}^*F_{kj} \\ &= \sum_k \frac{\sqrt{n_i}}{n}\chi^{(k)}(C_i)^*\chi^{(k)}(C_j) \\ &= \delta_{ij}\end{aligned}$$

这便是特征标的第二正交性质.

这种正交关系反映了特征标表中各列间的正交关系.

全部 l^2 个不等价不可约表示特征标矩阵的矩阵元 $\chi^{(\gamma)}(C_i)$ 构成特征标表，特征标表在表示理论的应用中是十分重要的.

所有的群都存在一个一维恒等表示，就是群与一维空间的单位矩阵，也就是与数 1 同态的表示，它的表示矩阵也就是特征标全部为 1. 这个表示当然是不可约的，在所有有限群特征标表中，都把这个表示的特征标列在特征标表的第一行.

另外，所有单位元的不可约表示的特征标均为

$$\chi^{(\gamma)}(e) = \sum_i A_{ii}^{\gamma}(e) = d(\gamma) \tag{1.11.14}$$

$d(\gamma)$ 为不可约表示 (γ) 的维数，因而特征标表的第一列为不可约表示的维数. 不可约表示的维数可由公式

$$\sum_{\gamma=1}^{l} d(\gamma)^2 = n \quad 或 \quad \sum_{\gamma=2}^{l} d(\gamma)^2 = n-1$$

来确定($\gamma=1$ 的表示为恒等表示)，对阶数不是很高的有限群，一般可唯一地决定各种不可约表示的维数.

比如 D_3 群 $l=3$，$n=6$，由 $d_1^2+d_2^2+d_3^2=n$，可定出唯一的 $d_1=d_2=1$，$d_3=2$. 正八面体群(O 群) $l=5$，$n=24$ 可定出 $d_\gamma=1, 1, 2, 3, 3$. 最大的点群正二十面体群 I_h，它的 $n=120$，有 10 个类，因而不可约表示的维数为：1 维表示 2 个，3 维表示 4 个，4 维表示 2 个，5 维表示 2 个，即

$$2\cdot 1^2+4\cdot 3^2+2\cdot 4^2+2\cdot 5^2=120$$

特征标原则上可由两种正交性，即

$$\frac{1}{n}\sum_i n_i \chi^{(\gamma)}(C_i)^* \chi^{(\delta)}(C_i) = \delta_{\gamma\delta}$$

$$\sum_\gamma \frac{n_i}{n}\chi^{(\gamma)}(C_i)^* \chi^{(\gamma)}(c_j) = \delta_{ij}$$

来计算. 由于这些方程是二次联立方程，实际求解是很麻烦和困难的.

例 1 D_3 群的特征标表.

D_3 群的特征标表如下：

D_3	E	$2C_z(2\pi/3)$	$3C_1(\pi)$
A_1	1	1	1
A_2	1	a	b
E	2	c	d

由行正交性得到

$$1+2a+3b=0$$
$$2+2c+3d=0$$

由列正交性得到

$$1+a+2c=0,\quad 1+b+2d=0$$

解得

$$a=-b=1,\quad c=-1,\quad d=0$$

1.12　直积表示和直积群的表示

1.12.1　直积表示

如果矩阵群$\{A(g)\}$和$\{B(g)\}$是群G的两个表示，表示A和B的维数分别为$d(a)$和$d(b)$. 定义A与B的直积(direct product)为

$$A(g) \otimes B(g) = C(g) \tag{1.12.1}$$

C为$m_a m_b$维的矩阵，其矩阵元为

$$C_{\mu\nu,\delta\pi}(g) = A_{\mu\delta}(g) B_{\nu\pi}(g) \tag{1.12.2}$$

用4个角标标记表示矩阵元. μ, δ取1, 2, 3, …, $d(a)$; ν, π取1, 2, …, $d(b)$. 有人称这种矩阵为超矩阵. 则表示$\{A(g)\}$与表示$\{B(g)\}$的直积$\{C(g)\}$也是群G的一个表示，称为直积表示.

首先指出直积矩阵的乘法为矩阵的直乘积

$$C = A \otimes B, \quad C' = A' \otimes B' \tag{1.12.3}$$

而矩阵C与C'之积是矩阵的普通积，即

$$CC' = (A \otimes B)(A' \otimes B') = (AA') \otimes (BB') \tag{1.12.4}$$

注意AA'表示两个矩阵的积，$\otimes$表示矩阵的直积，按定义

$$(CC')_{\alpha\beta,\gamma\tau} = \sum_{\delta\pi} C'_{\alpha\beta,\delta\pi} C_{\delta\pi,\gamma\tau} = \sum_{\delta\pi} A_{\alpha\delta} B_{\delta\pi} A'_{\delta\gamma} B'_{\pi\tau}$$

由(1.12.4)得到

$$(CC')_{\alpha\beta,\gamma\tau} = \sum_{\delta} A_{\alpha\delta} A'_{\delta\gamma} \sum_{\pi} B_{\beta\pi} B'_{\pi\tau}$$

因而(1.12.4)式是正确的.

由于

$$\det C = \det(A \otimes B) = \det A \det B$$

因而若A、B都是非奇异矩阵，C也是非奇异矩阵，C存在逆，它的逆为

$$C^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1} \tag{1.12.5}$$

这一点容易证明，即

$$CC^{-1} = (A \otimes B)(A^{-1} \otimes B^{-1}) = (AA^{-1}) \otimes (BB^{-1}) = E$$

$$C^{-1}C = (A^{-1} \otimes B^{-1})(A \otimes B) = (AA^{-1}) \otimes (BB^{-1}) = E$$

E为$d(a) \times d(b)$维的单位矩阵.

而

$$\begin{aligned} C(g)C(g') &= (A(g) \otimes B(g))(A(g') \otimes B(g')) \\ &= (A(g)A(g')) \otimes (B(g)B(g')) \\ &= A(gg') \otimes B(gg') = C(gg') \end{aligned}$$

这便证明了直积$\{(A(g) \otimes B(g) = C(g)\}$确实是群$G$的表示.

如果表示A和B都是不可约表示，即

$$(\chi^{(A)}, \chi^{(A)}) = (\chi^{(B)}, \chi^{(B)}) = 1$$

这里$\chi^{(A)}$和$\chi^{(B)}$分别是不可约表示 A 和 B 的特征标.

则直积表示 $C(g)=A(g)\otimes B(g)$ 的特征标为

$$
\begin{aligned}
\chi^{(C)}(g) &= \mathrm{tr}C(g) = \sum_{\mu\nu} C_{\mu\nu,\mu\nu}(g) \\
&= \sum_{\mu\nu} A(g)_{\mu\mu} B(g)_{\nu\nu} = \chi^{(A)}(g)\chi^{(B)}(g)
\end{aligned}
\tag{1.12.6}
$$

则特征标$\chi^{(C)}$的内积为

$$
\begin{aligned}
(\chi^{(C)},\chi^{(C)}) &= \frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(C)*}(g)\chi^{(C)}(g) \\
&= \frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(A)*}(g)\chi^{(B)}(g)^{*}\chi^{(A)}(g)\chi^{(B)}(g)
\end{aligned}
\tag{1.12.7}
$$

一般此式并不等于 1，因而直积表示 C 并不是不可约表示.

因而直积表示 $A(g)\otimes B(g)$ 可分解为不可约表示的直和，即

$$
A\otimes B = \sum_{c} a_c(AB)C \tag{1.12.8}
$$

C 为不可约表示，它们的特征标为

$$
\chi^{A\otimes B} = \sum_{c} a_c(AB)\chi^{C}
$$

由特征标正交定理

$$
(\chi^{A\otimes B},\chi^{C'}) = \sum_{c} a_c(AB)(\chi^{C},\chi^{C'}) = a_{c'}(AB) \tag{1.12.9}
$$

得到了在直积表示 $A\otimes B$ 不可约分解中不可约表示 c 出现的重复度 $a_{c'}(AB)$.

1.12.2 直积群的表示

元素集合 $H=\{h_1, h_2, \cdots, h_n\}$ 和 $F=\{f_1, f_2, \cdots, f_m\}$ 是两个群，由它们可构成直积群 G：$\{g_1, g_2, \cdots, g_k\}$，$k=mn$，直积群 G 的元素为

$$
g_{ij} = h_i f_j
$$

如果 $A^{(H)}$ 和 $A^{(F)}$ 分别是它们的表示，则 $A^{(H)}$ 与 $A^{(F)}$ 的直积

$$
U(g_{ij}) = A^{(H)}(h_i)\otimes A^{(F)}(f_j) \tag{1.12.10}
$$

为直积群 G 的表示，即两个群表示的直积构成直积群的表示. 因为直积群 G 中群元素的乘法规则为

$$
g_{\alpha\beta}g_{\delta\pi} = (h_\alpha f_\beta)(h_\delta f_\pi) = (h_\alpha h_\delta)(f_\beta f_\pi) = h_i f_j = g_{ij} \tag{1.12.11}
$$

其中

$$
h_\alpha h_\delta = h_i, \quad f_\beta f_\pi = f_j
$$

而矩阵 $U(g_{\alpha\beta})$ 与 $U(g_{\delta\pi})$ 相乘为

$$
\begin{aligned}
U(g_{\alpha\beta})U(g_{\delta\pi}) &= (A^{(H)}(h_\alpha)\otimes A^{(F)}(f_\beta))(A^{(H)}(h_\delta)\otimes A^{(F)}(f_\pi)) \\
&= (A^{(H)}(h_\alpha)A^{(H)}(h_\delta))\otimes(A^{(F)}(f_\beta)A^{(F)}(f_\delta)) \\
&= A^{(H)}(h_i)\otimes A^{(F)}(f_j) = U(g_{ij})
\end{aligned}
\tag{1.12.12}
$$

这说明$\{U(g_{ij})\}$确实是直积群 $G=H\otimes F$ 的表示.

表示 U 的特征标称为

$$\chi^{(U)} = \chi^{(H)}\chi^{(F)} \tag{1.12.13}$$

因而它的内积为

$$\begin{aligned}(\chi^{(U)}, \chi^{(U)}) &= \frac{1}{nm}\sum_{g_{ij}\in G}\chi^{(U)}(g_{ij})^*\chi^{(U)}(g_{ij}) \\ &= \frac{1}{nm}\sum_{h_i\in H}\sum_{f_j\in F}\chi^{(H)}(h_i)^*\chi^{(F)}(f_j)^*\chi^{(H)}(h_i)\chi^{(F)}(f_j) \\ &= (\chi^{(H)}, \chi^{(H)})(\chi^{(F)}, \chi^{(F)})\end{aligned} \tag{1.12.14}$$

其中 m 和 n 分别为表示 $A^{(H)}$ 和 $A^{(F)}$ 的维数. 这说明若 $A^{(H)}$ 和 $A^{(F)}$ 分别为群 H 和 F 的不可约表示，即

$$(\chi^{(H)}, \chi^{(H)}) = (\chi^{(F)}, \chi^{(F)}) = 1$$

则

$$(\chi^{(U)}, \chi^{(U)}) = 1$$

即 U 是群 G 的不可约表示.

群 H 有 l_h 个共轭类，以 h_i 为代表的类为

$$C_i^h = \{h_j h_i h_j^{-1},\ h_j \in H\},\quad i = 1, 2, \cdots, l_h$$

群 F 有 l_f 个共轭类，以 f_α 为代表的类 C_α^f 为

$$C_\alpha^f = \{f_\gamma f_\alpha f_\gamma^{-1} \mid f_\gamma \in F\},\quad \alpha = 1, 2, \cdots, l_f$$

直积群 $G = H\otimes F$ 的以元素 $g_{i\alpha}$ 为代表的共轭元素类为

$$C_{i\alpha} = \{g_{j\beta} g_{i\alpha} g_{j\beta}^{-1} \mid g_{j\beta} \in G\}$$

由直积群元素的定义

$$g_{j\beta} g_{i\alpha} g_{j\beta}^{-1} = (h_j f_\beta)(h_i f_\alpha)(h_j^{-1} f_\beta^{-1}) = (h_j h_i h_j^{-1})(f_\beta f_\alpha f_\beta^{-1})$$

得到类 $C_{i\alpha}$ 为

$$C_{i\alpha} = C_i^h C_\alpha^f \tag{1.12.15}$$

即 G 群包括 $l_h l_f$ 个共轭元素类. 因而 G 群有 $l_h l_f$ 个不等价不可约表示，这些不可约表示可由群 H 和 F 的不可约表示的直积构成，即群 G 的全部不等价不可约表示为

$$U^{(\gamma,\delta)}(g_{ij}) = A^{(\gamma)}(h_i)\otimes A^{(\delta)}(f_j)$$
$$(\gamma = 1, 2, \cdots, l_h,\quad \delta = 1, 2, \cdots, l_f)$$

共为 $l_h l_f$ 个. 直积表示 $U^{(\gamma,\delta)}$ 的维数为 $n_\gamma m_\delta$，n_γ 与 m_δ 分别为表示 $A^{(\gamma)}$ 和 $A^{(\delta)}$ 的维数，于是群 G 全部不等价不可约表示维数平方和为

$$\sum_{\gamma\delta}(n_\gamma m_\delta)^2 = (\sum_\gamma n_\gamma^2)(\sum_\delta n_\delta^2) = nm \tag{1.12.16}$$

n 为群 H 的阶，m 为群 F 的阶，nm 为直积群 G 的阶.

1.13　有限群不可约表示的分类

如果 $D^{(\Gamma)}$ 是有限群 G 的不可约表示，显然表示矩阵的复数共轭 $D^{(\Gamma)*}$（它的矩阵元为 $d_{ij}^{(\Gamma)*}(g)$，$d_{ij}^{(\Gamma)}$ 是表示矩阵 $D^{(\Gamma)}(g)$ 的矩阵元）也是群 G 的一个表示. 由此可把群 G 的不可约表示分为三种：

(1) A 种不可约表示——实表示：若不可约表示 $D^{(\Gamma)}$ 与 $D^{(\Gamma)*}$ 是等价表示，而且可通过对基矢的适当选择使表示矩阵 $D^{(\Gamma)}(g)\to D^{(\Gamma)*}(g)$，则为实表示(表示矩阵元为实数)；

(2) B 种不可约表示：虽然不可约表示 $D^{(\Gamma)}(g)$ 与复共轭表示 $D^{(\Gamma)*}(g)$ 是等价表示，但不能通过基矢选择使 $D^{(\Gamma)}(g)\to D^{(\Gamma)*}(g)$，称为 B 种表示，也称赝实表示.

(3) C 种表示：不可约表示 $D^{(\Gamma)}(g)$ 与复共轭表示 $D^{(\Gamma)*}(g)$ 不是等价表示.

判别群 G 的不可约表示是属于哪种表示，有如下定理.

定理 1.13.1 若 D 是群 G 的不可约表示，复共轭表示 D^* 与 D 是等价表示，即 $D^*(g)=CD(g)C^{-1}$，则变换矩阵 C 只能是 $\tilde{C}=\pm C$. 而且当 $C=\tilde{C}$ 时，不可约表示为 A 种表示，即实表示；当 $\tilde{C}=-C$ 时 D 为 B 种表示，即赝实表示(D 与 D^* 虽然等价，但不是实表示).

证明 如果不可约酉表示 D 与 D^* 等价，即存在酉矩阵 C 使

$$D^*(g) = CD(g)C^{-1} \tag{1.13.1}$$

于是对(1.13.1)式取复数共轭得到

$$D(g) = C^*D^*(g)(C^{-1})^*$$

由(1.13.1)式得到

$$D(g) = C^*CD(g)C^{-1}(C^{-1})^* = C^*CD(g)(C^*C)^{-1} \tag{1.13.2}$$

这表明对所有 g 的不可约表示矩阵 $D(g)$ 均与矩阵(C^*C)交换，根据 Schur 引理，(C^*C)为常数矩阵，即

$$C^*C = mE \tag{1.13.3}$$

m 为常数，E 为单位矩阵，$D(g)$为酉矩阵 $D(g)^{-1}=D(g)^+$，因而容易由(1.13.2)式得到

$$D(g) = C^+CD(g)(C^+C)^{-1}$$

由此得到

$$C^+C = NE \tag{1.13.4}$$

由(1.13.3)和(1.13.4)式得到

$$\det[C^*C] = \det[C^*]\det[C] = |\det C|^2 = M^n$$

$$\det[C^+C] = \det[\tilde{C}^*]\det[C] = |\det C|^2 = N^n$$

(n 为不可约表示 $D(g)$的维数). 因而 $M=\pm N$，即

$$C^+C = \pm C^*C = \tilde{C}^*C$$

由此得到

$$\tilde{C} = \pm C$$

这就证明了定理的第一部分.

如果 D 是 A 种表示(实表示)，也就是存在一个矩阵 B，使 $BD(g)B^{-1}$为它的复共轭矩阵，即

$$[BD(g)B^{-1}]^* = BD(g)B^{-1} \tag{1.13.5}$$

而

$$[BD(g)B^{-1}]^* = B^* D(g)^* B^{-1*}$$

因而

$$B^* D(g)^* B^{-1*} = BD(g)B^{-1}$$

亦即

$$B^{-1}B^* D(g)^* B^{-1*}B = D(g)$$

两端取复共轭得到

$$\begin{aligned} D(g)^* &= (B^{-1*}B)D(g)(B^{-1}B^*) \\ &= B^{-1*}BD(g)(B^{-1*}B)^{-1} \end{aligned}$$

与(1.13.1)式相比较得到

$$B^{-1*}B = C$$

由此得到

$$B^{-1*}B = \tilde{B}(\tilde{B^{-1}})^* = (\tilde{B^{-1}})^*B = \tilde{C} \tag{1.13.6}$$

这就证明了当 $C=\tilde{C}$ 时，为实表示.

当 $C=-\tilde{C}$ 时，不可能存在(1.13.5)式，因而此时为 B 种表示，这就证明了这个定理.

定理 1.13.2　如果不可约表示 $D^{(\Gamma)}$ 的特征标为 $\chi^{(\Gamma)}$，则

$$\sum_{g\in G}\chi^{(\Gamma)}(g^2) = \begin{cases} n, & D^{(\Gamma)}\ \text{为实表示(A 类)} \\ 0, & D^{(\Gamma)}\ \text{与}\ D^{(\Gamma)*}\ \text{不等价(C 类)} \\ -n, & D^{(\Gamma)}\ \text{与}\ ^{(\Gamma)*}\ \text{等价，但不是实表示(B 类)} \end{cases}$$

证明

$$\begin{aligned} \sum_{g\in G}\chi^{(\Gamma)}(g^2) &= \sum_{g\in G}\sum_{i} D^{(\Gamma)}(g^2)_{ii} = \sum_{g\in G}\sum_{i,k} D^{(\Gamma)}(g)_{ik}D^{(\Gamma)}(g)_{ki} \\ &= \sum_{g\in G}\sum_{i,k} D^{(\Gamma)}(g)_{ik}D^{(\Gamma)*}_{ki}(g)^* \end{aligned} \tag{1.13.7}$$

根据广义正交定理，若 $D^{(\Gamma)}$ 与 $D^{(\Gamma)*}(g)$ 是不等价表示，则(1.13.7)式为0. 因此证明了定理对于 C 种表示是正确的. 若 $D^{(\Gamma)}(g)$ 与 $D^{(\Gamma)*}(g)$ 等价，由定理 1.13.1，$D^{(\Gamma)}(g) = C^{-1}D^{(\Gamma)}(g)^*C$，于是由不可约表示的广义正交定理得到

$$\begin{aligned} \sum_{g\in G}\chi^{(\Gamma)}(g^2) &= \sum_{g\in G}\sum_{ik}\sum_{lm} D^{(\Gamma)}(g)_{ik}C^{-1}_{kl}D^{(\Gamma)}(g)^*_{lm}C_{mi} \\ &= \sum_{ik}\sum_{lm} C^{-1}_{kl}C_{mi}\frac{n}{n_d}\delta_{il}\delta_{km} = \pm n \end{aligned} \tag{1.13.8}$$

上式中 n 为群的阶，n_d 为不可约表示 Γ 的维数，当 $C=\tilde{C}$ 时，上式取 + 号；当 $C=-\tilde{C}$ 时，取负号. 这就证明了 A 种和 B 种表示的判别条件.

利用定理 1.13.2 就可判断不可约表示属于哪一种，判断不可约表示的种属在许多实际应用中是很有用的.

第二章　点　群

现实空间是定义了向量长度和向量间角度的三维实空间，即三维实西空间或者说是三维正交空间. 对于这个空间中的有限的具有一定对称性的形体，存在着保持这种形体不变的线性变换的集合，它们构成了这种形体的对称群. 由于形体是有限的，因而保持形体不变的变换至少在变换过程中有一个点不动，因此称保持有限形体不变的对称群为点群. 称每一个群元素为对称操作，因为在这个操作下形体保持不变，即形体具有这个变换的对称性. 三维实正交空间，最普遍的齐次线性变换群，是实正交群 $O(3,\mathbf{R})$（$\mathbf{R}$ 表示实空间）或简记为 $O(3)$，因而点群都是三维实正交空间群 $O(3)$ 的有限子群.

点群在晶体理论和分子理论中是十分重要的. 本章讨论点群，主要讨论点群及其共轭类和每个点群包括哪些对称操作，并严格证明了可能存在的点群.

2.1　三维正交群

三维实空间定义了向量的内积之后为三维实内积空间，即三维实正交空间. 这个空间中的全部线性变换构成三维正交群，记为 $O(3)$，每个线性变换都可表示为 3×3 的实正交矩阵. 按定义实正交矩阵具有性质

$$M^{-1}=\tilde{M},\quad \tilde{m}_{ij}=m_{ji} \tag{2.1.1}$$

m_{ij}为矩阵 M 的矩阵元，$\tilde{m}_{ij}$为转置矩阵 $\tilde{M}$ 的矩阵元. 由于

$$\det M=\det\tilde{M} \tag{2.1.2}$$

因而

$$\det(M\tilde{M})=(\det M)^2=1 \tag{2.1.3}$$

正交矩阵 M 的行列式

$$\det M=\pm1 \tag{2.1.4}$$

于是可把 $O(3)$ 的全部元素分解为两个子集

$$\{M|\det M=1\}\quad 和\quad \{M'|\det M'=-1\}$$

容易看到，$O(3)$ 的子集 $\{M|\det M=1\}$ 本身构成一个群，它是 $O(3)$ 的子群，称为三维单模正交群，记为 $SO(3)$. 由于两个行列式为 (-1) 的三维正交矩阵 M'，M''之积的行列式为 1，即 $\det\{M'M''\}=1$，因而子集 $\{M'|\det M'=-1\}$ 不是封闭的，它们不是一个子群.

$O(3)$ 还存在一个二阶子群 $I=\{e,i\}$，e 为单位元，i 为空间反演，即

$$e=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\quad i=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

而且 $O(3)$ 与 I 同态，即 $O(3)$ 中所有 $\det M=1$ 的元素 M 对应于 I 中的元素 e，所有 $\det M'$

$= -1$ 的元素 M'对应于 I 的元素 i, $SO(3)$为同态核. 因而 $O(3)$可表示为子 $SO(3)$的两个陪集的直和, 即

$$O(3) = e \cdot SO(3) \oplus i \cdot SO(3)$$

由于反演矩阵 i 与所有矩阵 M 交换, 因而 $SO(3)$的右陪集 $i \cdot SO(3)$等于左陪集 $SO(3) \cdot i$, 这说明 $SO(3)$和 I 都是 $O(3)$的不变子. 由 1.3 讨论可知 $O(3)$为直积群

$$O(3) = I \otimes SO(3)$$

下面证明 $\det M = 1$ 的正交矩阵代表绕一定轴的转动.

对于 $SO(3)$的任意元素 M, 下面将证明都存在一个向量 $\boldsymbol{r}$, 在它的作用下不变, 即

$$M\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} \quad \text{或} \quad M\boldsymbol{r} = E\boldsymbol{r} \tag{2.1.5}$$

E 为单位矩阵. 在基矢$(\boldsymbol{i}_1, \boldsymbol{i}_2, \boldsymbol{i}_3)$中,

$$\boldsymbol{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \boldsymbol{i}_i = (x_1, x_2, x_3)\begin{pmatrix} \boldsymbol{i}_1 \\ \boldsymbol{i}_2 \\ \boldsymbol{i}_3 \end{pmatrix}$$

矩阵 M 的矩阵元为 m_{ij}, 因而(2.1.5)式可写为本征方程的形式, 即

$$(M - E)\boldsymbol{r} = (x_1, x_2, x_3)(M - E)\begin{pmatrix} \boldsymbol{i}_1 \\ \boldsymbol{i}_2 \\ \boldsymbol{i}_3 \end{pmatrix} = 0$$

其分量式为奇次线性方程, 即

$$\sum_j (m_{ij} - \delta_{ij}) x_j = 0 \tag{2.1.5'}$$

这个方程有解的条件是系数行列式为 0, 即

$$\det(M - E) = 0 \tag{2.1.6}$$

容易证明

$$\begin{aligned} \det(M - E) &= \det(\tilde{M} - E) = \det(M^{-1} - E) \\ &= \det[M^{-1}(E - ME)] = \det(M^{-1})\det(E - M) \\ &= \det(E - M) = -\det(M - E) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{2.1.7}$$

因而方程(2.1.5)或(2.1.5′)恒有解.

这说明每一个单模正交矩阵所表示的变换, 都有一个向量 $\boldsymbol{r}$ 在这个变换下不变, 因而这种线性变换一定是绕这个不变向量转动的旋转变换, 称这个向量为旋转轴. 于是 $SO(3)$也就是三维空间绕一切通过坐标原点的向量而转动的旋转群, 也记为 R_3. R_3 的全部变换均保持所有旋转轴的共同的交点(坐标原点)不变.

下面寻求绕任意轴 $\boldsymbol{a}$ 转动 α 角的转动矩阵 $R_a(\alpha)$. 单位向量 $\boldsymbol{a}$ 的方向余弦为 (l, m, n), 即

$$a_x = l = \sin\theta\cos\varphi, \quad a_y = m = \sin\theta\sin\varphi, \quad a_z = n = \cos\theta$$

θ 为 $\boldsymbol{a}$ 与 z 轴之夹角, φ 为 $\boldsymbol{a}$ 在 x-y 平面上投影与 x 轴之夹角.

设绕转轴 R_b为把 $\boldsymbol{a}$ 轴转到 z 轴的转动. 于是转动 $R_a(\alpha)$可表示为

$$R_a(\alpha)=R_b^{-1}R_z(\alpha)R_b$$

即先把 $\boldsymbol{a}$ 转动 z 轴，再绕 z 轴转 α 角，然后再把 z 轴转动到 $\boldsymbol{a}$. 而把 $\boldsymbol{a}$ 转为 z 轴可分两步进行，即先绕 z 轴转 $-\varphi$ 角，然后绕 y 轴转 $-\theta$ 角，因而

$$R_b=R_y(-\theta)R_z(-\varphi),\qquad R_b^{-1}=R_z(\varphi)R_y(\theta)$$

于是

$$R_a(\alpha)=R_z(\varphi)R_y(\theta)R_z(\alpha)R_y(-\theta)R_z(-\varphi)$$

已知

$$R_z(\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$R_y(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta & 0 & \sin\theta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta\end{pmatrix}$$

这样，经过计算便可得到绕方向余弦为 (l, m, n) 的轴 $\boldsymbol{a}$ 转动 α 角的转动矩阵为

$$R_{nlm}(\alpha)=R_a(\alpha)$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\alpha+l^2(1-\cos\alpha) & lm(1-\cos\alpha)-n\sin\alpha & ln(1-\cos\alpha)+m\sin\alpha\\ lm(1-\cos\alpha)+n\sin\alpha & \cos\alpha+m^2(1-\cos\alpha) & \mathrm{nm}(1-\cos\alpha)-l\sin\alpha\\ ln(1-\cos\alpha)-m\sin\alpha & \mathrm{mn}(1-\cos\alpha)+l\sin\alpha & \cos\alpha+n^2(1-\cos\alpha)\end{pmatrix}\tag{2.1.8}$$

其中转动角 α 的变化范围为 $0\leqslant\alpha<2\pi$，轴的方向余弦满足条件 $l^2+m^2+n^2=1$，存在两个独立变量，这两个独立变量都是连续变化的. (2.1.8)式与(1.7.2)式给出的用 Euler 角表达的转动公式，都是很重要的.

$O(3)$ 除转动之外的元素是

$$\{iR_a(\alpha)\}$$

称之为转动反演变换.

$O(3)$ 的元素作用到三维空间中的向量 $\boldsymbol{r}$，使之变为另一个向量 $\boldsymbol{r}'$，即

$$M\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'\qquad(M\in O(3))$$

写成坐标的形式为

$$M\boldsymbol{r}=M\left((x_1,x_2,x_3)\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}_1\\ \boldsymbol{i}_2\\ \boldsymbol{i}_3\end{pmatrix}\right)=(x_1,x_2,x_3)M\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}_1\\ \boldsymbol{i}_2\\ \boldsymbol{i}_3\end{pmatrix}$$

$$=(x_1',x_2',x_3')\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}_1\\ \boldsymbol{i}_2\\ \boldsymbol{i}_3\end{pmatrix}=\boldsymbol{r}'$$

即

$$x_i'=\sum_j m_{ji}x_j\qquad(m_{ji}\text{ 为 }M\text{ 的矩阵元})$$

这个表达式表示转动空间，而基矢不变，本书均采用这种表述.

由此可看到在 $O(3)$ 的所有元素作用下，只有坐标原点 $O(0,0,0)$ 保持不变，即

$$MO = O$$

因而 $O(3)$ 保持坐标原点不动.

空间向量 $\boldsymbol{r} = \sum_i x_i \boldsymbol{i}_i$，代表空间中坐标为 (x_1, x_2, x_3) 的一个点 x. 可以通过 $O(3)$ 元素作用下研究点 $x(x_1, x_2, x_3)$ 的变化. 称点 $x(x_1, x_2, x_3)$ 在群 $O(3)$ 全部元素作用下所经过的全部点为包括 x 点的 $O(3)$ 的轨迹. 即

$$\text{经过 } x \text{ 点的 } O(3) \text{ 的轨迹} = \{Mx \mid M \in O(3)\}$$

显然 $O(3)$ 经过 x 点的轨迹是半径为 $r^2 = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$ 的球面. 因为

$$M\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$$

$O(3)$ 保持内积不变，即

$$(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = (\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}') \quad \text{或} \quad x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = x_1'^2 + x_2'^2 + x_3'^2$$

满足这种关系的全部点的集合为半径为 $\sqrt{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}$ 的球面，因此也称 $O(3)$ 具有球对称性.

2.2　点群概要

$O(3)$ 的有限阶子群称为点群，上节已指出 $O(3)$ 的全部变换至少保持坐标原点不变，因而点群的变换也至少保持一个点不变，这也是把这类群称为点群的原因.

2.2.1　点群的分类

由于 $O(3)$ 可表示为 $SO(3)$ 与反演群 I 的直积，即 $O(3) = SO(3) \otimes I$，因而点群也可分为两大类，第一类点群为 $SO(3)$ 的子群，即第一类点群 $G \subset SO(3)$. 它的全部元素由纯转动构成，即 $M \in G$，$\det M = 1$. 第二类点群是 $O(3)$ 的子群，但不是 $SO(3)$ 的子群，它即包括行列式为 1 的纯转动，也包括行列式为 (-1) 的非纯转动.

2.2.2　点群元素的类型

点群除单位元外，包括三种类型的元素：

1. *绕一定轴 $\boldsymbol{a}$ 的转动*

这种转动可表示为 $R_a(\varphi)$，$\boldsymbol{a}$ 代表旋转轴，φ 为绕轴 $\boldsymbol{a}$ 的转角，当给定转轴 $\boldsymbol{a}$ 后，转动由(2.1.8)式给出. 由(2.1.8)式可以证明，绕同一转轴 $\boldsymbol{a}$ 相继转动 φ 和 ψ，结果为绕该轴转动 $\varphi + \psi$，即

$$R_a(\varphi) R_a(\psi) = R_a(\psi) R_a(\varphi) = R_a(\varphi + \psi) \qquad (2.2.1)$$

所有转动行列式均为 1，即

$$\det R_a(\varphi) = 1$$

由于点群是有限群，因而对任意转动，一定有一个正整数使

$$R_a(\varphi)^n = R_a(n\varphi) = R_a(2\pi) = e$$

由此得到点群对任何一个轴的转动角一定为 $\varphi=\frac{2\pi}{n}$，称这种轴为 n 重轴. 这种变换(称为操作)表示为 C_n^k，表示绕一定 n 重轴转 $\frac{2\pi}{n}k$ 角.

第一类点群的全部元素由各种转动构成.

2. *反射面*

对于第二类点群除转动外，还包括 $iR_a(\varphi)$，或 $iR_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)$，即空间反演与转动之积. 当 $\varphi=\pi$ 时，由(2.1.8)式得到

$$iR_a(\pi)=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1+2l^2&2lm&2ln\\2lm&-1+2m^2&2mn\\2ln&2mn&-1+2n^2\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1-2l^2&-2lm&-2ln\\-2lm&1-2m^2&-2mn\\-2ln&-2mn&1-2n^2\end{pmatrix}$$

它描述以 $\boldsymbol{a}$ 为法线的平面 σ_a 的镜像反射称为反射面. 为了清楚看到这一点，分别取 $\boldsymbol{a}$ 平行 x，y，z 轴的三种情况，得到

$$iR_z(\pi)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}=\sigma_z$$

$$iR_x(\pi)=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}=\sigma_x$$

$$iR_y(\pi)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}=\sigma_y$$

它们分别为法线为 z，x，y 轴的三个反射面. 因而平面反射(或称反射面)为第二类点群的一种元素.

3. *转动反演或转动反射*

称 $iR\left(\frac{2\pi}{n}\right)$ 为 n 重转动反演轴，它也是第二类点群的一种元素. 但是在点群中通常使用的是 Schoenflie 引入的 n 重轴的转动反射 S_n，即

$$S_n=S_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)=\sigma_aR_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)\quad 或\quad S_n=\sigma_hC_n \tag{2.2.2}$$

它为以 $\boldsymbol{a}$ 为法线的反射面 σ_a 与绕 $\boldsymbol{a}$ 转动 $\frac{2\pi}{n}$ 角的转动之积. 由于 $\sigma_a=iR_a(\pi)$，于是得到

$$S_n=S_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)=iR_a(\pi)R_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)=iR_a\left(\frac{2\pi}{n}+\pi\right)=iC_{2n}^{n+2} \tag{2.2.3}$$

(2.2.3)式给出了转动反演与转动反射间的关系.

按定义可得到

$$S_n^m=\sigma_h^m C_n^m=\begin{cases}C_n^m, & \text{当 } m \text{ 为偶数}\\ \sigma_h C_n^m, & \text{当 } m \text{ 为奇数}\end{cases}$$

因而当 n 为偶数时，$S_n^n=e$；n 为奇数时，$S_n^n=\sigma_h$. σ_h 表示以旋轴为法线的反射面.

在点群中把 S_n 看为一种独立的对称操作，它代表绕轴转动$\left(\frac{2\pi}{n}\right)$后再经历一次垂直于旋转轴的平面反射，实际上是一种复合的对称操作.

2.2.3 点群共轭类的划分

寻求群的共轭类，是群论中的一个重要问题，对于共轭类的划分有以下原则.

1. *共轭元素具有相同的行列式*

如果元素 A 与 C 共轭，即存在元素 B，使

$$BAB^{-1}=C$$

对上式取它们的行列式，即

$$\det(BAB^{-1})=\det B\det A\det B^{-1}=\det A=\det C$$

因而共轭元素 A 与 C 行列式相同. 因此在点群元素中，只能是转动元素与转动元素共轭，非转动元素与非转动元素共轭.

2. *共轭元素的表示矩阵有相同的迹*

如果 A 与 C 共轭，即

$$BAB^{-1}=C$$

两端取迹，得到

$$\mathrm{tr}(BAB^{-1})=\mathrm{tr}C$$

容易证明

$$\mathrm{tr}(BAB^{-1})=\mathrm{tr}(B^{-1}BA)=\mathrm{tr}A$$

因而

$$\mathrm{tr}A=\mathrm{tr}C$$

这表明相互共轭的元素一定有相同的迹.

由(2.1.8)可看到绕任意轴 $\boldsymbol{a}$ 的转动的迹为

$$\mathrm{tr}R_a(\varphi)=2\cos\varphi+1$$

因而绕不同轴转动相同角的元素才可能是共轭元素. 转动反演的迹为

$$\mathrm{tr}[iR_a(\varphi)]=-(1+2\cos\varphi)$$

因而也只有转角相同的转动反演才可能相互共轭. 当 $\varphi=\pi$ 时为反射面，因而反射面与反射面才可能相互共轭为同一类.

3. *等价轴与等价面*

群的一个变换 A 通过元素 B 变为变换 C，则称 A 与 C 是等价变换，变换 B 把 A 变为 C 的数学表达式为

$$B^{-1}AB=C$$

因而等价变换所有表示的操作是相互共轭元素，相互等价的变换属于同一个共轭类，如果 A 是一个 n 重轴，与之等价的元素 C 也只能是 n 重轴(可能是另一个 n 重轴，也可能是它本身)．如果 A 是反射面，C 也是反射面．即点群中存在等价轴和等价面．如 n 重轴 C_n 与 C_n' 是等价轴，即存在变换 B，使

$$B^{-1}C_nB=C_n'$$

则由 C_n 轴和 C_n' 轴构成的转动反射

$$S_n=\sigma C_n=iC_2C_n=iC_a\left(\frac{2\pi}{n}+\pi\right)$$

和

$$S_n'=\sigma C_n'=iC_2'C_n'=iC_{a'}\left(\frac{2\pi}{n}+\pi\right)$$

也是等价元素，因为 i 与任何元素都可交换，于是

$$\begin{aligned}B^{-1}S_nB&=B^{-1}iC_a\left(\frac{2\pi}{n}+\pi\right)B\\&=iB^{-1}C_a\left(\frac{2\pi}{n}+\pi\right)B\\&=iC_{a'}\left(\frac{2\pi}{n}+\pi\right)\\&=S_n'\end{aligned}$$

这说明在第二类点群中，如果 C_n 轴与 C_n' 轴是等价轴，则由它们产生的 S_n 与 S_n' 也是等价元素，称为等价转动反射轴.

容易看到，绕等价轴转动相同角度的两个元素是共轭元素，它们属于同一共轭类，绕等价转动反射轴转动相同角度的元素也是共轭元素，属于同一类.

4. 双向轴

如果对于 n 重轴 $C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)$，存在一个元素 A，使

$$A^{-1}C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)A=C_{-a}\left(\frac{2\pi}{n}\right)=C_a\left(-\frac{2\pi}{n}\right)$$

称这种 n 重轴为双向轴，即 n 重轴 $\boldsymbol{a}$ 与 $-\boldsymbol{a}$ 为等价轴．显然对于双向轴 C_n^p 与 C_n^{n-p} 为同一共轭类，因为

$$\begin{aligned}&A^{-1}C_a\left(\frac{2p\pi}{n}\right)A\\&=A^{-1}C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)AA^{-1}C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)AA^{-1}\cdots A^{-1}C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)A\\&=C_a\left(-\frac{2p\pi}{n}\right)\end{aligned}$$

即 $C_a\left(\frac{2p\pi}{n}\right)=C_n^p$ 与 $C_a\left(-\frac{2p\pi}{n}\right)=C_n^{n-p}$ 共轭.

在点群中双向轴可由两种情况构成：

(1) 存在与 n 重轴垂直的二重轴，此时取 n 重轴为 $\boldsymbol{a}$，二重轴为 $\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{a}\perp\boldsymbol{b}$，于是

$$C_b(\pi)C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)C_b(\pi)=C_a\left(-\frac{2\pi}{n}\right)$$

即 n 重轴为双向轴.

(2) 存在通过 n 重轴的反射面 σ_v，反射面 σ_v 的法线 $\boldsymbol{b}$ 与 n 重轴 $\boldsymbol{a}$ 相垂直，即 $\sigma_v=iC_b(\pi)$，于是

$$\sigma_v C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)\sigma_v=iC_b(\pi)C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)iC_b(\pi)=C_a\left(-\frac{2\pi}{n}\right)$$

同样 n 重轴为双向轴.

这种双向轴可从几何上更深刻地予以说明. 反射面 σ_v 把轴 $\boldsymbol{a}$ 反射为轴 $\boldsymbol{a}$，即 $\boldsymbol{a}$ 是自身的像，轴 $\boldsymbol{a}$ 与它的像 $\boldsymbol{a}$ 为等价轴. 但是绕像轴 $\boldsymbol{a}$ 的转动应当是绕轴 $\boldsymbol{a}$ 转动的像，因而绕像轴 $\boldsymbol{a}$ 的转动为绕轴 $\boldsymbol{a}$ 的负转动. 在这种意义上 n 重轴 $\boldsymbol{a}$ 为双向轴.

除了双向轴外，C_n^p 与 C_n^{n-p} 不属于同一类，也可称这种 n 重轴为单向轴.

比如存在一个与 n 重轴垂直的反射面 σ_h. 此时 σ_h 的法线与 n 重轴平行，因而

$$\sigma_h C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)\sigma_h=iC_a(\pi)C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)iC_a(\pi)=C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)$$

在这种情况下的 C_n 为单向轴. $\boldsymbol{a}$ 对于反射面 σ_h 的像虽然为 $-\boldsymbol{a}$，但是在像空间绕像轴 $-\boldsymbol{a}$的转动也为负转动，而 $R_{-a}(-\varphi)=R_a(\varphi)$，这表明 $R_a(\varphi)$与 $R_a(-\varphi)$并非共轭元素.

有了上面这些原则，点群元素的分类就容易进行了. 首先观察等价轴，绕等价轴转相同角的转动为同一类；然后再观察双向轴，对于双向轴 C_n^p 与 C_n^{n-p} 为同一类. 对第二类点群再研究等价面，相互等价的面为一个类，由等价轴可以找到等价转动反射，从而完成了对转动反射的分类.

2.3 第一类点群

由纯转动构成的点群为第一类点群，它们共有五大类. 下面讨论它们.

2.3.1 单轴点群

一个 n 重轴构成的点群称为单轴点群，记为 $\mathscr{C}_n$. 不失一般性，取轴与 z 轴重合，则 $C_z\left(\frac{2\pi k}{n}\right)$的矩阵表示为

$$C_z\left(\frac{2\pi k}{n}\right)=C_n^k=\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi k}{n} & -\sin\frac{2\pi k}{n} & 0\\ \sin\frac{2\pi k}{n} & \cos\frac{2\pi k}{n} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

显然它是一 Abel 群，这种群有 n 个元素，每个元素为一类，共 n 个类.

特殊情况是当 $n=1$，即为 $\mathscr{C}_1$ 时，它只有一个单位元 $e=C_z(2\pi)$.

2.3.2 二面体群

如果一个点群除一个 n 重轴之外，还存在垂直于这个 n 重轴的二重轴，则称这种群

为二面体群(dihedrel group)，简记为 D_n.

下面证明，如果存在与 n 重轴相垂直的二重轴，群的封闭性要求，一定在与 n 重轴相垂直的平面上存在 n 个二重轴，相邻二重轴之间的夹角为$\frac{\pi}{n}$.

不失一般性，取 n 重轴为 z 轴，一个二重轴为 x 轴，则

$$C_z\left(\frac{2k\pi}{n}\right)=\begin{pmatrix}\cos\frac{2k\pi}{n} & -\sin\frac{2k\pi}{n} & 0\\ \sin\frac{2k\pi}{n} & \cos\frac{2k\pi}{n} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$C_x(\pi)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

于是

$$C_z\left(\frac{2k\pi}{n}\right)C_x(\pi)=\begin{pmatrix}\cos\frac{2k\pi}{n} & \sin\frac{2k\pi}{n} & 0\\ \sin\frac{2k\pi}{n} & -\cos\frac{2k\pi}{n} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}=C_{a_k}(\pi) \tag{2.3.1}$$

与(2.1.8)式相比较，可以看出(2.3.1)式为绕方向余弦为($l=\cos\frac{k\pi}{n}$, $m=\sin\frac{k\pi}{n}$, $n=0$)的轴 a_k 转 π 角的转动，这个轴与 x 轴夹角为$\frac{k\pi}{n}$, $k=1, 2, \cdots, n-1$. 这就证明了存在相邻轴间夹角为$\frac{\pi}{n}$的 n 个二重轴的论断.

因而 D_n 的阶为 $2n$，

$$D_n=\{e, C_n^k(k=1, 2, \cdots, n-1), C_2^{(i)}(i=1, 2, \cdots, n)\}$$

其中

$$C_2^{(i)}=\begin{pmatrix}\cos\frac{2(i-1)\pi}{n} & \sin\frac{2(i-1)\pi}{n} & 0\\ \sin\frac{2(i-1)\pi}{n} & -\cos\frac{2(i-1)\pi}{n} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$C_n^k=\begin{pmatrix}\cos\frac{2k\pi}{n} & -\sin\frac{2k\pi}{n} & 0\\ \sin\frac{2k\pi}{n} & \cos\frac{2k\pi}{n} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

下面讨论 D_n 的类. 为了对群元素进行分类，需要研究 n 个二重轴中哪些是等价轴. 为此，把第 k 个二重轴进行转动，即

$$
\begin{aligned}
&(C_n^p)^{-1}C_2^{(k)}C_n^p \\
&=\begin{pmatrix}\cos\frac{2p\pi}{n} & \sin\frac{2p\pi}{n} & 0\\ -\sin\frac{2p\pi}{n} & \cos\frac{2p\pi}{n} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\\
&\quad\begin{pmatrix}\cos\frac{2(k-1)\pi}{n} & \sin\frac{2(k-1)\pi}{n} & 0\\ \sin\frac{2(k-1)\pi}{n} & -\cos\frac{2(k-1)\pi}{n} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{2p\pi}{n} & -\sin\frac{2p\pi}{n} & 0\\ \sin\frac{2p\pi}{n} & \cos\frac{2p\pi}{n} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\\
&=\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi}{n}(2p+k-1) & \sin\frac{2\pi}{n}(2p+k-1) & 0\\ \sin\frac{2\pi}{n}(2p+k-1) & -\cos\frac{2\pi}{n}(2p+k-1) & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\\
&=C_2^{(2p+k)}
\end{aligned}
\tag{2.3.2}
$$

(2.3.2)式说明 C_n^p 把第 k 个二重轴 $C_2^{(k)}$ 变为了 $C_2^{(2p+k)}$，也就是说 $C_2^{(k)}$ 与 $C_2^{(k+2p)}$ $(p=1, 2, \cdots, n)$是等价轴，或者说相互间夹角为$\frac{2p\pi}{n}$的二重轴是等价轴.

n 为奇数和 n 为偶数的 D_{2m+1}和 D_{2m}，n 个二重轴间的等价关系可得到两种不同情况. 如果 n 为偶数，在 n 个二重轴 $C_2^{(i)}$ 中$\frac{n}{2}$个奇数编号的二重轴为等价轴，$\frac{n}{2}$个偶数编号的二重轴为等价轴. 但是当 n 为奇数时，如果二重轴 k 与 k'间夹角为$\frac{(2p+1)\pi}{n}$，k 与 k'的延长线 k''之间的夹角为

$$\frac{(2p+1)\pi}{n}+\pi=\frac{(2p+1+n)\pi}{n}, \quad n\text{ 为奇数},$$

因而$\frac{(2p+1+n)\pi}{n}=\frac{2l\pi}{n}$，$l$ 为偶数. 这说明虽然 k 与 k'因夹角为$\frac{(2p+1)\pi}{n}$似乎是不等价的，但是 k 与 k''是等价轴，实际上 k 与 $k'(k'')$还是等价的，由此得到全部 n 个二重轴都是等价轴.

由于存在与 C_n 轴相垂直的 n 个二重轴，因而 C_n 轴为双向轴，C_n^k 与 C_n^{n-k} 为一个共轭类.

通过上述分析，D_n 的共轭类分为两种情况：当 n 为偶数，即 $n=2m$ $(m=1, 2, 3, \cdots)$时，D_{2m}包括 $m+3=\frac{n}{2}+3$ 个类：

$$\{e\}, \quad \{C_{2m}^k, \quad C_{2m}^{2m-k}\}, m=1, 2, \cdots, m-1,$$

$$\{C_{2m}^m=C_2\}, \quad \{C_2^{(1)}, C_2^{(3)}\cdots C_2^{(2m-1)}\}, \quad \{C_2^{(2)}, C_2^{(4)}\cdots C_2^{2m}\}$$

当 n 为奇数，即 $n=2m+1$ （$m=1, 2, 3, \cdots$）时，D_{2m+1}包括 $m+2=\frac{n+3}{2}$个类：

$$\{e\},\quad \{C_{2m+1}^{k},\quad C_{2m+1}^{2m+1-k}\},\quad k=1, 2, \cdots, m$$
$$\{C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, \cdots, C_2^{(2m+1)}\}$$

D_n 包括不变子群 $\mathscr{C}_n$，因而 D_n 可按 $\mathscr{C}_n$ 分为两个陪集：

$$D_n=\mathscr{C}_n \oplus C_2^{(1)}\mathscr{C}_n,\quad C_2^{(1)}\mathscr{C}_n=\{C_2^{(1)}, C_2^{(2)}\cdots C_2^{(n)}\}$$

商群 $D_n/\mathscr{C}_n$ 同构于 $\mathscr{C}_2$. D_{2m}还存在一个不变子群 D_m，因而相应商群为 D_{2m}/D_m，它同构于 $\mathscr{C}_2$.

2.3.3 正四面体群

保持正四面体不变的全部转动构成一个群，称为正四面体群，记为 T.

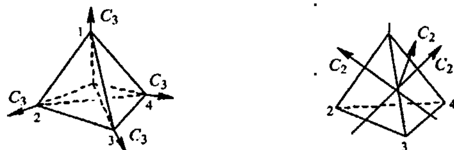


图 2.3.1 正四面体群的对称元素

在图 2.3.1 中给出了正四面体，它有四个顶点 a, b, c, d(图中点 1, 2, 3, 4)，6 个棱 ab, ac, ad, bc, bd, cd 和四个面 abc, abd, acd, bcd，记四个面的中心分别为 A, B, C 和 D. 显然四个顶点与相对面心的连线为保持正四面体不变的三重轴，记它们为 $C_3^{(1)}$, $C_3^{(2)}$, $C_3^{(3)}$ 和 $C_3^{(4)}$. 六个棱中相对棱的中点的连线为保持正四面体不变的三个二重轴，记为 $C_2^{(1)}$, $C_2^{(2)}$, $C_2^{(3)}$ 加上单位元共 12 个元素构成了保持正四面体不变的群，即为正四面体群.

$$T=\{e, C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}, C_3^{(1)}, C_3^{(1)2}, C_3^{(2)}, C_3^{(2)2}, C_3^{(3)}, C_3^{(3)2}, C_3^{(4)}, C_3^{(4)2}\}$$

这 12 个元素也可由 4 个数的置换描述，记顶点 a, b, c, d 为 1, 2, 3, 4. 于是绕棱 ab 和 cd 中点连线构成的二重轴 $C_2^{(1)}$ 相当于置换$\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&1&4&3\end{pmatrix}$. d 与 abc 之面心 D 的连线构成的三重轴 $C_3^{(1)}$ 相当于置换$\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&3&1&4\end{pmatrix}$. 经如此分析可得到 T 的元素与置换的对应关系为

$$e\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&2&3&4\end{pmatrix},\quad C_2^{(1)}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&1&4&3\end{pmatrix},\quad C_2^{(2)}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&3&2&1\end{pmatrix}$$
$$C_2^{(3)}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&4&1&2\end{pmatrix},\quad C_3^{(1)}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&3&1&4\end{pmatrix},\quad C_3^{(1)2}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&1&2&4\end{pmatrix}$$
$$C_3^{(2)}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&1&3&2\end{pmatrix},\quad C_3^{(2)2}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&4&3&1\end{pmatrix},\quad C_3^{(3)}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&2&4&1\end{pmatrix}$$
$$C_3^{(3)2}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&2&1&3\end{pmatrix},\quad C_3^{(4)}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&4&2&3\end{pmatrix},\quad C_3^{(4)2}\leftrightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&3&4&2\end{pmatrix}$$

这 12 个置换构成 24 阶的四个数的置换群 S_4 的一个子群，称为 S_4 的偶置换子群(这个子群的全部置换均为偶置换). 因而 T 群与 S_4 群的偶置换同构，这也是第七章给出的 Cayley 定理具体实例，于是 T 的元素与 S_4 群的偶置换群元素有相同的乘法规则.

置换群将在本书第七章中进行详细讨论. 下面仅简要给出两个置换相乘的计算规则，以便利用它寻求 T 群的乘法关系.

一个置换$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n \end{pmatrix}$表示 1 变为 i_1, 2 变为 i_2, 3 变为 i_3, …, n 变为 i_n. 也就是说置换的实质是把第一行中的数 k 变为第二行的数 i_k，因而与置换符号中 $k \to i_k$ 的各列顺序无关，于是

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 5 & 7 & \cdots & n & n-1 \\ i_3 & i_5 & i_7 & \cdots & i_n & i_{n-1} \end{pmatrix} = \cdots$$

$$= \begin{pmatrix} 5 & 6 & \cdots & n & \cdots & n-4 \\ i_5 & i_6 & \cdots & i_n & \cdots & i_{n-4} \end{pmatrix}$$

两个置换

$$p_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n \end{pmatrix}, \quad p_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ j_1 & j_2 & j_3 & \cdots & j_n \end{pmatrix}$$

的乘积规则为：首先把置换 p_1 的上行按置换 p_2 的下行顺序写出，

$$p_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 & \cdots & j_n \\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_n \end{pmatrix}$$

则 p_1 与 p_2 之积为

$$\begin{aligned} p_1p_2 &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ j_1 & j_2 & j_3 & \cdots & j_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 & \cdots & j_n \\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ j_1 & j_2 & j_3 & \cdots & j_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

利用置换的乘法规则，对 S_4 的偶置换群元素的乘法，即 T 元素的乘法得到

$$\begin{aligned} C_3^{(1)}C_2^{(1)}C_3^{(1)-1} &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 4 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 2 & 4 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = C_2^{(2)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_3^{(1)}C_2^{(2)}C_3^{(1)-1} &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix} = C_2^{(3)} \end{aligned}$$

因而证明三个二重轴 $C_2^{(1)}$，$C_2^{(2)}$，$C_2^{(3)}$ 是等价轴，它们属于一个共轭类.

同样可得到

$$C_3^{(2)}C_3^{(1)}C_3^{(2)-1} = C_3^{(2)}C_3^{(1)}C_3^{(2)2} = C_3^{(3)}$$
$$C_3^{(1)}C_3^{(2)}C_3^{(1)-1} = C_3^{(1)}C_3^{(2)}C_3^{(1)2} = C_3^{(4)}$$
$$C_3^{(2)}C_3^{(3)}C_3^{(2)-1} = C_3^{(2)}C_3^{(3)}C_3^{(2)2} = C_3^{(4)}$$

这表明 $C_3^{(1)}$ 与 $C_3^{(3)}$ 等价，$C_3^{(3)}$ 与 $C_3^{(4)}$ 等价，$C_3^{(2)}$ 也与 $C_3^{(4)}$ 等价，因而 $C_3^{(1)}$，$C_3^{(2)}$，$C_3^{(3)}$ 与 $C_3^{(4)}$ 都是等价轴，因而它们属于一个类.

对上式取逆

$$[C_3^{(2)}C_3^{(1)}C_3^{(2)-1}]^{-1} = C_3^{(2)}C_3^{(1)-1}C_3^{(2)-1} = C_3^{(3)-1}$$

可得到 $C_3^{(1)-1}$，$C_3^{(2)-1}$，$C_3^{(3)-1}$ 和 $C_3^{(4)-1}$ 为等价元素，它们构成一个类.

由此得到 T 包括四个类：

$$\{e\},\quad \{C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}\},\quad \{C_3^{(1)}, C_3^{(2)}, C_3^{(3)}, C_3^{(4)}\}$$
$$\{C_3^{(1)2}, C_3^{(2)2}, C_3^{(3)2}, C_3^{(4)2}\}$$

从几何上可看到三个二重轴相互垂直，这种性质也可由下述计算得到证明：

$$C_2^{(1)}C_2^{(2)} = \begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&1&4&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&3&2&1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&4&1&2\end{pmatrix} = C_2^{(3)}$$
$$C_2^{(2)}C_2^{(1)} = \begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&3&2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&1&4&3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&4&1&2\end{pmatrix} = C_2^{(3)}$$

即

$$C_2^{(1)}C_2^{(2)} = C_2^{(2)}C_2^{(1)}$$

而只有相互正交的二重轴才是可交换的，这一点可如下证明. 取二个二重轴所在平面为 z-y 面，第一个二重轴为 z 轴，即 $C_z(\pi)$，第二个二重轴与 z 轴夹角为 α，记为 $C_\alpha(\pi)$，于是

$$C_z(\pi) = \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\quad C_\alpha(\pi) = \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-\cos2\alpha&\sin2\alpha\\0&\sin2\alpha&\cos2\alpha\end{pmatrix}$$

于是

$$C_z(\pi)C_\alpha(\pi) = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&\cos_2\alpha&-\sin_2\alpha\\0&\sin_2\alpha&\cos_2\alpha\end{pmatrix} = R_x(2\alpha)$$
$$C_\alpha(\pi)C_z(\pi) = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&\cos_2\alpha&\sin_2\alpha\\0&-\sin_2\alpha&\cos_2\alpha\end{pmatrix} = R_x(-2\alpha)$$

因而只有 $\alpha = \frac{\pi}{2}$时，第二个二重轴为 y 轴，才能使

$$C_z(\pi)C_y(\pi) = C_y(\pi)C_z(\pi) = C_x(\pi)$$

从而证明 T 中三个二重轴相互垂直.

由上述讨论证明 T 的子群 $\{e, C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}\}$ 为 D_2. 由于 $\{C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}\}$ 为 T 的一个类，因而子群 D_2 为 T 的不变子群.

按不变子群 D_2 把 T 分为两个陪集，即

$$T = D_2 \oplus C_3^{(1)} D_2 \oplus C_3^{(1)^2} D_2$$

两个陪集为

$$C_3^{(1)} D_2 = \{C_3^{(1)}, C_3^{(2)}, C_3^{(3)}, C_3^{(4)}\}$$
$$C_3^{(1)^2} D_2 = \{C_3^{(1)^2}, C_3^{(2)^2}, C_3^{(3)^2}, C_3^{(4)^2}\}$$

商群 T/D_2 同构与 $\mathscr{C}_3$，即

$$T/D_2 \leftrightarrow C_3$$
$$D_2 \leftrightarrow e$$
$$C_3^{(1)} D_2 \leftrightarrow C_3$$
$$C_3^{(1)^2} D_2 \leftrightarrow C_3{}^2$$

如果取正四面体重心为坐标原点，以三个相互垂直的二重轴为 x, y, z 轴，也容易得到 T 的转动矩阵 $C_3^{(i)}$ 和 $C_2^{(i)}$，在 3.3 节中给出了这些结果.

2.3.4　正八面体群

在图 2.3.2 中给出了立方体及其内接正八面体的图形. 立方体六个面的中心点连线构成立方体内接正八面体的 12 个棱. 保持立方体或正八面体不变的所有转动构成一个群，称为正八面体群(octahedral group)，记为 O.

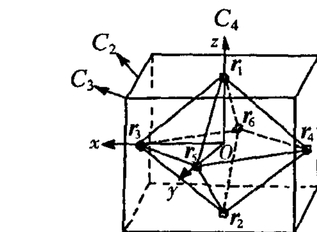


图 2.3.2　立方体及其内接正八面体

连接立方体相对面的中心，得到三条线，以它们为四重轴，全部转动保持立方体不变. 如以立方体中心为原点，以这三个轴为 x, y, z 坐标，则这三个四重轴为 $C_x\left(\frac{\pi}{2}\right)$, $C_y\left(\frac{\pi}{2}\right)$, $C_z\left(\frac{\pi}{2}\right)$. 它们表示的矩阵为

$$C_x\left(\frac{\pi}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_y\left(\frac{\pi}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_z\left(\frac{\pi}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

加上

$$C_x\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 = C_x(\pi), \quad C_y\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 = C_y(\pi), \quad C_z\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 = C_z(\pi),$$
$$C_x\left(\frac{\pi}{2}\right)^3 = C_x\left(\frac{3\pi}{2}\right), \quad C_y\left(\frac{\pi}{2}\right)^3 = C_y\left(\frac{3\pi}{2}\right), \quad C_z\left(\frac{\pi}{2}\right)^3 = C_z\left(\frac{3\pi}{2}\right)$$

共 9 个元素.

立方体 12 个棱，相对棱中点连线构成 6 个二重轴，它们都保持立方体不变. 容易得到这些二重轴矩阵为

$$C_2^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad C_2^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$C_2^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_2^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$C_2^{(5)} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_2^{(6)} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

比如在立方体 x-y 剖面上存在两个二重轴，容易得到它们的矩阵即为 $C_2^{(1)}$ 和 $C_2^{(2)}$，同样可得到 x-z 面和 y-z 面上的四个二重轴为 $C_2^{(3)}$，$C_2^{(4)}$，$C_2^{(5)}$，$C_2^{(6)}$.

最后立方体四个对角线为保持立方体不变的四个三重轴，它们的矩阵为

$$C_3^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_3^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$C_3^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_3^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

从几何分析可得到两个对角线的方向余弦分别为

$$\left(l = \frac{1}{\sqrt{3}}, m = \frac{1}{\sqrt{3}}, n = \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad 和 \quad \left(l = -\frac{1}{\sqrt{3}}, m = -\frac{1}{\sqrt{3}}, n = \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

利用(2.1.8)式即可得上述 $C_3^{(1)}$ 和 $C_3^{(2)}$ 的矩阵表达式. 在另一个包括两个对角线的剖面上给另两个三重轴 $C_3^{(3)}$ 和 C_3^4，这四个三重轴给出了 8 个元素.

上述对称元素共 23 个，加上单位元就构成了 24 阶的 O.

通过 $C_z\left(\frac{2\pi}{4}\right)$转动可把 $C_x\left(\frac{2\pi}{4}\right)$变为 $C_y\left(\frac{2\pi}{4}\right)$，即

$$\begin{aligned} & C_z\left(\frac{\pi}{2}\right)^{-1} C_x\left(\frac{\pi}{2}\right) C_z\left(\frac{\pi}{2}\right) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= C_y\left(\frac{\pi}{2}\right) \end{aligned}$$

因而 $C_x\left(\frac{2\pi}{4}\right)$与 $C_y\left(\frac{2\pi}{4}\right)$是等价轴. 同样它们与 $C_z\left(\frac{2\pi}{4}\right)$也是等价轴. 这三个四重轴每一个

都与另外两个四重轴相垂直，因而存在与之垂直的二重轴 C_4^2，这样这些四重轴都是双向轴. 因而这 12 个元素分为两类，即

$$\left\{C_x\left(\frac{2\pi}{4}\right),\ C_x\left(\frac{2\pi}{4}\right)^3,\ C_y\left(\frac{2\pi}{4}\right),\ C_y\left(\frac{2\pi}{4}\right)^3,\ C_z\left(\frac{2\pi}{4}\right),\ C_z\left(\frac{2\pi}{4}\right)^3\right\}$$

$$\left\{C_x\left(\frac{2\pi}{4}\right)^2=C_x(\pi),\ C_y\left(\frac{2\pi}{4}\right)^2=C_y(\pi),\ C_z\left(\frac{2\pi}{4}\right)^2=C_z(\pi)\right\}$$

同样，通过四重轴的转动可把 6 个二重轴中的一个变为另一个，也可把四个三重轴中的一个变为另一个，因而 6 个二重轴是等价轴，它们为一个共轭类，即 $\{C_2^{(1)},\ C_2^{(2)},\ \cdots,\ C_2^{(6)}\}$. 四个三重轴也是等价轴，而且每个三重轴都存在一个与之垂直的二重轴 $C_2^{(i)}$，因而它们还是双向轴，于是得到一个共轭类 $\{C_3^{(1)},\ C_3^{(2)},\ C_3^{(3)},\ C_3^{(1)2},\ C_3^{(2)2},\ C_3^{(3)2}\}$，加上单位元，$O$ 共 5 个共轭类.

O 存在一个由 12 个元素构成的子群 T，即 $\{e,\ C_x(\pi),\ C_y(\pi),\ C_z(\pi),\ C_3^{(1)},\ C_3^{(2)},\ C_3^{(3)},\ C_3^{(4)},\ C_3^{(1)2},\ C_3^{(2)2},\ C_3^{(3)2},\ C_3^{(4)2}\}$，这个子群包括了 O 的完整的三个类，因而是不变子群. 不变子群 T 把 O 分为两个陪集，即

$$O=T\oplus C_2^{(1)}T,\quad C_2^{(1)}T=\{C_2^{(1)},\ C_2^{(2)},\ \cdots,\ C_2^{(6)}\}$$

因而商群 O/T 同构于 $\mathscr{C}_2$. O 存在子群链 $O\supset T\supset D_2\supset\mathscr{C}_2$.

2.3.5　正二十面体群

在图 2.3.3 中给出了正二十面体的图形，它的表面由 20 个正三角形构成，有 12 个顶点和 30 个棱. 它的内接多面体为正十二面体，由 12 个正五边形构成，20 个顶点 30 个棱. 正二十面体中 20 个正三角形均匀地分为相对 10 对，每一对正三角形中心的连线给出 10 个三重轴，绕它们转动保持二十面体不变，它们提供了 I 的 20 个元素 $\{C_3^{(i)},\ C_3^{(i)2},\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ 10\}$. 内接十二面体有表面 12 个正五边形，相对正五边形中心连线给出 6 个五重轴 $\{C_5^{(i)}\ i=1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6\}$，它们也保持二十面体不变，因而给出 24 个对称元素 $\{C_5^{(i)k}\mid i=1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6;\ k=1,\ 2,\ 3,\ 4\}$. 二十面体还有 30 个棱，相对棱中点连线给出保持二十面体不变的二重轴 $\{C_2^{(i)},\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ 15\}$，又给出 15 个对称元素，再加单位元共有 60 个元素，这些对称元素构成的群即为正二十面体群 (I) 或正十二面体群 (K).

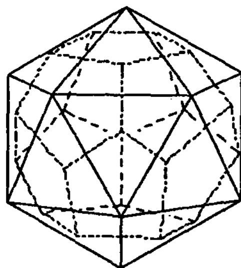


图 2.3.3　正二十面体及其内接正十二面体

可以证明 I 的全部二重轴，三重轴和五重轴都是等价轴，因而绕相同重轴转相同角的元素属于一个类. 而且三重轴和五重轴都与一定的二重轴垂直，因而是双向轴. 由此得到 I 的 60 个元素分为 5 个类，即

$$\{e\},\quad \{C_2^{(i)},\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ 15\},\quad \{C_3^{(i)},\ C_3^{(i)2},\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ 10\}$$

$$\{C_5^{(i)},\ C_5^{(i)4},\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ 6\},\quad \{C_5^{(i)2},\ C_5^{(i)3},\ i=1,\ 2,\ 3,\ \cdots,\ 6\}$$

2.4 第二类点群

第二类点群是 $O(3)$ 的子群而不是 $SO(3)$ 的子群，它的元素 M 既有 $\det M=1$ 的纯转动，也有 $\det M=-1$ 的转动反演或转动反射，以及反射面或空间反演. 下面分别讨论它们.

2.4.1 由第一类点群 G 和空间反演群 $I=\{e, i\}$ 的直积构成的第二类点群

这种第二类点群具有形式

$$G^*=G\otimes I$$

如果第一类点群 G 的阶为 n，第二类点群 G^* 的阶为 $2n$. 第一类点群的每一个类仍然是 G^* 的类，另外还增加了 G 的每一类直乘 i 构成的 G^* 的类. 因而 G^* 的类数也是 G 的类数的 2 倍.

1. 第二类点群 $\mathscr{C}_n\otimes I$

第二类点群 $\mathscr{C}_n\otimes I$，有 $2n$ 个元素：

$$\mathscr{C}_n\otimes I=\{e, C_n, C_n^2, \cdots, C_n^{n-1}, i, iC_n, iC_n^2, \cdots, iC_n^{n-1}\}$$

由于反演 i 与任意 C_n^k 都交换，即 $iC_n^k=C_n^k i$，因而 iC_n^k 与 iC_n^p 都交换，$\mathscr{C}_n\otimes I$ 也是 Abel 群.

$\mathscr{C}_n\otimes I$ 可分为 n 为偶数和 n 为奇数两种情况. 下面分别讨论它们.

1° n 为偶数的 $\mathscr{C}_n\otimes I$

当 n 为偶数时，令 $n=2m$，此时 $\mathscr{C}_{2m}\otimes I$ 称为 $\mathscr{C}_{2mh}$. $\mathscr{C}_{2mh}$ 群中包括 $C_{2m}^m=C_a(\pi)$，因而也包括元素 $iC_{2m}^m=\sigma_h$（h 表示反射面垂直于 $2m$ 重轴）. 由于存在 σ_h 面是这类群的特征，因而称为 $\mathscr{C}_{2mh}$ 群. 它的元素为

$$\begin{aligned}\mathscr{C}_{2mh}=\{&e, C_{2m}, C_{2m}^2, \cdots, C_{2m}^{m-1}, C_2, C_{2m}^{m+1}, \cdots, C_{2m}^{2m-1}, i,\\ &iC_{2m}, iC_{2m}^2, \cdots, iC_{2m}^{m-1}, \sigma_h, iC_{2m}^{m+1}, \cdots, iC_{2m}^{2m-1}\}\end{aligned}$$

通常都用转动反射 S_{2m}^{2k+1} 和 S_m^{2k+1} 代替转动反演 iC_{2m}^k. 下面讨论两者之间的关系.

根据(2.2.2)式和(2.2.3)式

$$\begin{cases} S_{2m}=\sigma_h C_{2m}=iC_{2m}^{m+1} \\ S_m=\sigma_h C_m=iC_{2m}^{m+2} \end{cases} \tag{2.4.1}$$

于是得到

$$S_{2m}^{2k+1}=iC_{2m}^{m+2k+1}, \quad S_m^{2k+1}=iC_{2m}^{m+2(2k+1)}$$
$$S_{2m}^{2k}=C_{2m}^{2k+2m+1}, \quad S_m^{2k}=C_{2m}^{2k+2+m)}$$

当取 $k=1, 2, \cdots, m$ 便得到了全部元素 iC_{2m}^k.

下面以 $2m=2, 4, 6$ 为例给出 $\mathscr{C}_{2mh}$ 群用转动反射表示的全部元素.

$\mathscr{C}_{2h}$ 群：$\{e, C_2, i, \sigma_h\}$

$\mathscr{C}_{4h}$ 群：$\{e, C_4, C_4^2, C_4^3; i, S_4^3=iC_4, \sigma_h, S_4=iC_4^3\}$

$\mathscr{C}_{6h}$ 群：$\{e, C_6, C_6^2=C_3, C_6^3=C_2, C_6^4=C_3^2, C_6^5, i, S_3^5=iC_6,$
$S_6^5=iC_6^2, S_3^3=\sigma_h, S_6=iC_6^4, S_3=iC_6^5\}$

2°　n 为奇数的 $\mathscr{C}_{2m+1}\otimes I$

当 n 为奇数，即 $n=2m+1$（$m=0, 1, 2, \cdots$）时，$\mathscr{C}_{2m+1}\otimes I$ 称为 $S_{2(2m+1)}$ 群．这种群不存在反射面 σ，而全部元素都可用 $2(2m+1)$ 重转动反射轴 $S_{2(2m+1)}^k$ 描述．实际上是由 $2(2m+1)$ 重转动反射轴构成的循环群．按定义

$$S_{2(2m+1)}=iC_{2(2m+1)}^{2m+2}$$

于是

$$S_{2(2m+1)}^{2k}=C_{2(2m+1)}^{2(2m+2)2k}=C_{2m+1}^{(2m+2)k}=C_{2m+1}^{k}$$

当 $k=1, 2, \cdots 2m+1$ 时，给出了 $\mathscr{C}_{2m+1}$ 群的全部转动元素．

另一方面，

$$S_{2(2m+1)}^{2k+1}=iC_{2m+1}^{m+1+k}$$

当 $k=1, 2, \cdots, 2m+1$，便得到了全部元素 iC_{2m+1}^{p}，其中 $p=m+1+k>m$．容易看到当 $k<m$ 时，得到 iC_{2m+1}^{m+1+k}；当 $k=m$ 时，$iS_{2(2m+1)}^{2m+1}=i$；当 $k>m$ 时，记 $k=m+p$，于是 $S_{2(2m+1)}^{2(m+p)+1}=iC_{2m+1}^{p+1}$，$p<m$．

因而群 $S_{2(2m+1)}$ 为 $S_{2(2m+1)}$ 的循环群，即

$$\mathscr{C}_{2m+1}\otimes I=S_{2(2m+1)}=\{S_{2(2m+1)}^{k},\ k=1, 2, \cdots, 2(2m+1)\}$$

$$S_{2(2m+1)}^{2(2m+1)}=e$$

$$S_{2(2m+1)}^{2m+1}=i$$

由上述讨论得到

$$\mathscr{C}_n\otimes I=\begin{cases}\mathscr{C}_{2mh}, & n\text{ 为偶数 } n=2m\\ S_{2(2m+1)}, & n\text{ 为奇数 } n=2m+1\end{cases}\tag{2.4.2}$$

2. *第二类点群* $D_n\otimes I$

直积群 $D_n\otimes I$，也分 n 为偶数和 n 为奇数两种情况．下面分别进行讨论．

1°　D_{2mh} 群

当 n 为偶数 $2m$ 时，直积群 $D_{2m}\otimes I$ 为 D_{2mh} 群，即

$$D_{2m}\otimes I=D_{2mh}\tag{2.4.3}$$

由于 D_{2m} 群存在 $2m$ 个垂直 C_{2m} 轴的二重轴 $C_2^{(k)}$（$k=1, 2, \cdots, 2m$），因而 D_{2mh} 群存在 $2m$ 个反射面 $iC_2^{(k)}=\sigma_v^{(k)}$，这 $2m$ 个反射面的交线为 C_{2m} 轴，相邻反射面间夹角为 $\frac{\pi}{2m}$．由于 $2m$ 个二重轴为两个等价类，因而 $2m$ 个反射面 σ_v 也分为两个等价类，即 k 为奇数的 m 个反射面相互等价，k 为偶数的 m 个反射面相互为等价面．相邻的两个等价反射面间夹角为 $\frac{\pi}{m}$．

D_{2m} 群的元素 $C_{2m}^{m}=C_2$，因而 D_{2mh} 群还存在一个反射面 $iC_{2m}^{m}=\sigma_h$，这个反射面垂直于 C_{2m} 轴．

因而 D_{2mh} 群的元素为

$$\{e,\ C_{2m}^{k},\ C_{2m}^{m+k},\ C_2,\ C_2^{(i)},\ i,\ iC_{2m}^{k},\ iC_{2m}^{m+k},\ \sigma_h,\ \sigma_v^{(i)},\ k=1, 2, \cdots, m-1,\ i=1, 2, \cdots, 2m\}$$

其中 iC_{2m}^{k} 和 iC_{2m}^{m+k} 可用上节 $\mathscr{C}_{2mh}$ 群中讨论的方法表示为 S_{2m}^{2p+1} 和 S_{m}^{2p+1}.

D_{2mh} 群包括 $2(m+3)$ 个类，即子群 D_{2m} 的 $(m+3)$ 个类，再加上这些类乘以元素 i 得到的 $(m+3)$ 个类

2° 第二类点群 $D_{(2m+1)d}$

由奇数 $n=2m+1$ 的第一类点群 D_{2m+1} 与反演群 I 的直积构成 $D_{(2m+1)d}$ 群，即

$$D_{(2m+1)d}=D_{(2m+1)}\otimes I \tag{2.4.4}$$

由于 D_{2m+1} 群中不存在与 C_{2m+1} 轴相同方向的 C_2，因而这类群与 D_{2mh} 群的主要差别在于不存在垂直于 $2m+1$ 重轴的反射面，只有 $2m+1$ 个相互等价的反射面 $\sigma_v^{(k)}=iC_2^{(k)}$，它的元素为

$$\{C_{2m+1}^{k},\ C_2^{(k)},\ iC_{2m+1}^{k},\ \sigma_v^{(k)},\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ 2m+1\}$$
$$C_{2m+1}^{2m+1}=e,\ iC_{2m+1}^{2m+1}=i.$$

它有 $2(m+2)$ 个类，其中 $m+2$ 个类为子群 D_{2m+1} 的类，这些类乘以 i 得到另 $m+2$ 个类.

最后得到

$$D_n\otimes I=\begin{cases}D_{2mh}, & n\ \text{为偶数}\\ D_{(2m+1)d}, & n\ \text{为奇数}\end{cases}$$

D_n 是它们的不变子群，商群 D_{2mh}/D_{2m} 或 $D_{(2m+1)d}/D_{(2m+1)}$ 都同构与 I 群.

3. 第二类点群 T_h, O_h 和 K_h

第一类点群 T, O, K 与反演群 I 的直积给出三个第二类点群，即

$$T\otimes I=T_h,\quad O\otimes I=O_h,\quad K\otimes I=K_h \tag{2.4.5}$$

这些群中子群 T, O, K 的类仍然为 T_h, O_h 和 K_h 群的类，相应的增加由这些类乘以 i 得到的新的类，因而它们的类数分别为子群 T, O, K 的类数的二倍.

作为例子给出 T_h 群的元素.

$$T_h=\{e,\ C_2^{(1)},\ C_2^{(2)},\ C_2^{(3)},\ C_3^{(1)},\ C_3^{(2)},\ C_3^{(3)},\ C_3^{(4)},\ C_3^{(1)^2},\ C_3^{(2)^2},\ C_3^{(3)^2},\ C_3^{(4)^2},$$
$$i,\ \sigma^{(1)},\ \sigma^{(2)},\ \sigma^{(3)},\ S_3^{(1)^3},\ S_3^{(2)^3},\ S_3^{(3)^3},\ S_3^{(4)^3},\ S_3^{(1)},\ S_3^{(2)},\ S_3^{(3)},\ S_3^{(4)}\}$$

O_h 和 K_h 群中转动反演元素 iC_n^k 也可相似地变换为转动反射元素. 此处就不仔细讨论了.

2.4.2 不包括空间反演 i 的第二类点群

前面所讨论的直积型的第二类点群共同特征是包括空间反演元素 i. 另一种类型的第二类点群不包括反演元素 i，只包括反射面 σ 和转动反射轴 S_n^{2k+1}. 这种第二类点群都与一个第一类点群同构.

如果一个 $2n$ 阶的第一类点群 G 存在一个 n 阶不变子群 K(称指数为 2 的不变子群)，子群 K 的元素记为 K_i, $i=1,\ 2,\ \cdots,\ n$，不属于子群 K 的 G 群的其它元素记为 g_i, $i=1,\ 2,\ \cdots,\ n$. 则群 G 可分解为子群 K 的陪集，即

$$G=K\oplus g_iK=\{k_1,\ k_2,\ \cdots,\ k_m\}\oplus\{g_1,\ g_2,\ \cdots,\ g_m\}$$

两个陪集没有共同元素，因而 $g_ik_j\notin K$.

商群 G/K 同构于二阶循环群 $I=\{a,\ a^2=e\}$，同态核为 K，即

$$G/K \to I$$

$$K = \{k_1, k_2, \cdots, k_m\} \to e$$

$$g_\alpha K = \{g_1, g_2, \cdots, g_m\} \to a$$

由此可得到

$$\{g_1, g_2, \cdots, g_m\}\{g_1, g_2, \cdots, g_m\} = \{k_1, k_2, \cdots, k_m\}$$

即

$$g_i g_k = k_l$$

现在把 G 群中陪集$\{g_1, g_2, \cdots, g_n\}$代之以 ig_k，而子群 K 的元素不变. 于是得到元素集合$\{k_1, k_2, \cdots, k_n;\ ig_1, ig_2, \cdots, ig_n\}$，显然这个元素集合仍然为一个群，而且元素乘法规则为

$$k_i k_j = k_l, \quad k_l i g_p = i k_l g_p = i g_q, \quad i g_\alpha i g_\beta = g_\alpha g_\beta = k_\gamma$$

这个群与第一类点群 G 同构，记为群 G^*.

利用这种方法，可由存在阶数为某群阶数一半的不变子群的第一类点群构造出相应的不包括元素 i 的第二类点群. 由于$\{g_1, g_2, \cdots, g_n\}$中不包括单位元，因而$\{ig_1, ig_2, \cdots, ig_n\}$中不存在 i，只有反射面或转动反射轴. 这是这种第二类点群的基本特征.

下面对这种类型的第二类点群进行讨论.

1. 与 $\mathscr{C}_{2n}$群同构的第二类点群

$\mathscr{C}_{2n}$群存在一个 n 阶的不变子群 $\mathscr{C}_n$. 它按 $\mathscr{C}_n$ 群的陪集可分解为

$$\mathscr{C}_{2n} = \{\mathscr{C}_n\} \oplus C_{2n}\{\mathscr{C}_n\}$$

现在以 iC_{2n}代替 C_{2n}，得到第二类点群，即

$$\mathscr{C}^*_{2n} = \{\mathscr{C}_n\} \oplus iC_{2n}\{\mathscr{C}_n\}$$

这类群也按 n 为偶数和奇数分为两种情况：

1° $\mathscr{C}_{(2m+1)h}$群

对于 n 为奇数的 $\mathscr{C}_{2n} = \mathscr{C}_{2(2m+1)}$群，$\mathscr{C}_{2m+1}$为它的子群. 因而由元素

$$\{e, C_{2m+1}, C_{2m+1}^2, \cdots, C_{2m+1}^{2m}, iC_{2(2m+1)}, iC_{2(2m+1)}^3, \cdots, iC_{2(2m+1)}^{4m+1}\}$$

构成了与 $\mathscr{C}_{2(2m+1)}$同构的第二类点群，称为 $\mathscr{C}_{(2m+1)h}$群. 由于

$$\begin{aligned} iC_{2(2m+1)} &= \sigma_h C_a\left(\frac{2\pi}{2(2m+1)} + \pi\right) = \sigma_h C_a\left(\frac{2n(2m+2)}{2(2m+1)}\right) \\ &= \sigma_h C_a\left(\frac{2\pi(m+1)}{2m+1}\right) = \sigma_h C_{2m+1}^{m+1} \\ iC_{2(2m+1)}^{2k+1} &= \sigma_h C_a\left(\frac{2\pi(2k+1)}{2(2m+1)} + \pi\right) = \sigma_h C_a\left(\frac{2\pi(k+m+1)}{2m+1}\right) \\ &= \sigma_h C_{2m+1}^{k+m+1} \end{aligned}$$

这表明

$$iC_{2(2m+1)}^{2k+1} = \begin{cases} \sigma_h C_{2m+1}^{k+m+1}, & k < m \\ \sigma_h C_{2m+1}^{p}, & k > m,\ k = m+p \end{cases}$$

因而这个群实际上是 $\mathscr{C}_{2m+1}$群与反射面群 $C_s = \{e, \sigma_h\}$的直积群，即

$$\mathscr{C}_{(2m+1)h} = \mathscr{C}_{2m+1} \otimes C_s, \quad C_s = \{e, \sigma_h\} \tag{2.4.6}$$

它的元素为

$$e, \quad C_{2m+1}^k, \quad \sigma_h, \quad \sigma_h C_{2m+1}^k, \quad k=1,2,\cdots,2m$$

2° S_{4m}

当 n 为偶数 $2m$ 时，$\mathscr{C}_{4m}$群不变子群为 $\mathscr{C}_{2m}$，$\mathscr{C}_{4m}$可表示为 $\mathscr{C}_{2m}$陪集的直和，即

$$\mathscr{C}_{4m} = \{\mathscr{C}_{2m}\} \oplus C_{4m}\{\mathscr{C}_{2m}\}$$

因而与它同构的第二类点群为

$$S_{4m} = \{\mathscr{C}_{2m}\} \oplus iC_{4m}\{\mathscr{C}_{2m}\}$$

S_{4m}的元素为

$$C_{2m}^k, \quad k=1,2,\cdots,2m; \; iC_{4m}C_{2m}^k = iC_{4m}^{2k+1}, \quad k=1,2,\cdots,2m$$

按定义

$$S_{4m} = iC_a\left(\frac{2\pi}{4m}+\pi\right) = iC_a\left(\frac{(2m+1)2\pi}{4m}\right) = iC_{4m}^{2m+1}$$

前已指出

$$S_{4m}^{2k} = C_{2m}^k, \quad S_{4m}^{2k+1} = iC_{4m}^{2m+2k+1}$$

因而 S_{4m}的全部元素都可由转动反射元素 S_{4m}^p生成，即与 $S_{2(2m+1)} = \mathscr{C}_{2m+1} \otimes I$ 群一样，S_{4m}也是由 $4m$ 重转动反射构成的循环群.

$$S_{4m} = \{S_{4m}^k, \; k=1,2,\cdots,4m\} = \mathscr{C}_{2m} \otimes C_s \tag{2.4.7}$$

2. 与 D_n 同构的第二类点群

这种第二类点群可分为四种类型. 下面分别进行讨论.

1° 第二类点群 $\mathscr{C}_{nv}$

群 D_n 包括一个 n 阶的不变子群 $\mathscr{C}_n$，它可写为 $\mathscr{C}_n$ 群的陪集，即

$$D_n = \{\mathscr{C}_n\} \otimes C_2^{(1)}\{\mathscr{C}_n\}$$

于是以 $iC_2^{(1)} = \sigma_v^{(1)}$ 代替 $C_2^{(1)}$，得到第二类点群 $\mathscr{C}_{nv}$，即

$$\mathscr{C}_{nv} = \{e, C_n, C_n^2, \cdots, C_n^{n-1}, \sigma_v^{(1)}, \sigma_v^{(2)}, \cdots, \sigma_v^{(n)}\}, \quad \sigma_v^{(i)} = iC_2^{(i)}$$

这 n 个反射面法线与 C_n 轴垂直，它们相交于 C_n 轴.

当 n 为奇数时，n 个反射面 $\sigma_v^{(i)}$ 都是等价面，它们属于一个类. 而当 n 为偶数时，n 个反射面分为两个等价类. 这种情况与 D_n 相同.

在图 2.4.1 中给出了 D_3，D_4 和 $\mathscr{C}_{3v}$，$\mathscr{C}_{4v}$对称轴和对称面的示意图.

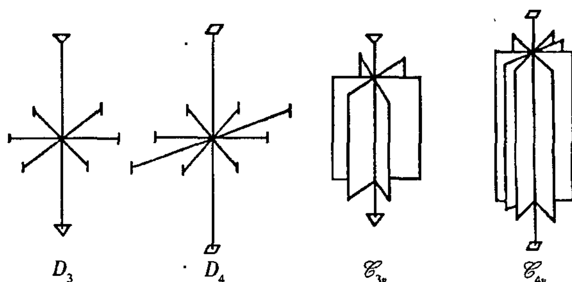


图 2.4.1 D_3，D_4 和 $\mathscr{C}_{3v}$，$\mathscr{C}_{3v}$的对称元素

2° 与 D_{2m}群同构的另一种第二类点群

对于 D_{2m}群除 $2m$ 阶的不变子群 $\mathscr{C}_{2m}$外，D_m 也是它的 $2m$ 阶子群，由它也可产生另外一种第二类子群.

这种第二类点群由子群 D_m 中 m 的奇偶性，又分为两类.

(i) 第二类点群 D_{2md}

第一类点群 D_{4m}存在一个 $4m$ 阶的不变子群 D_{2m}，

$$D_{4m} = \{C_{4m}^k, k = 1, 2, \cdots, 4m; C_2^{(k)}, k = 1, 2, \cdots, 4m\}$$

其中子群

$$D_{2m} = \{C_{4m}^{2k} = C_{2m}^k, k = 1, 2, \cdots, 2m; C_2^{(k)}, k = 1, 3, 5, \cdots, 4m-1\}$$

D_{4m}按子群 D_{2m}分为两个陪集，即

$$D_{4m} = D_{2m} \oplus \mathscr{C}_{4m} D_{2m}$$

第二个陪集的元素为

$$C_{4m}D_{2m} = \{C_{4m}^{2k+1}, k = 0, 1, 2, \cdots, (4m-1); C_2^{(k)}, k = 2, 4, 6, \cdots, 4m\}$$

当以 iC_{4m}代替 C_{4m}则得到 D_{2md}群，它的元素除 D_{2m}的元素外，还有元素集合 $iC_{4m}D_{2m}$：

$$iC_{4m}D_{2m} = \{iC_{4m}^{2k+1}, k = 0, 1, 2, \cdots, (2m-1);$$
$$iC_2^{(k)} = \sigma_d^{(k)}, k = 2, 4, 6, \cdots, 4m\}$$

其中 $2m$ 个反射面 $\sigma_d^{(k)}$ 是等价面. 相邻面间夹角为$\frac{\pi}{2m}$，而 $iC_{4m}^{2k+1} = S_{4m}^{2(m+k)+1}$. 因而 D_{2md}群的元素为

$$D_{2md} = \{C_{2m}^k, k = 1, 2, \cdots, 2m; C_2^{(k)}, k = 1, 3, 5, \cdots, 4m-1;$$
$$S_{4m}^{2k+1}, k = 1, 2, \cdots, 2m; \sigma_d^{(k)}, k = 1, 2, \cdots, 2m\}$$

下面作为例子给出 D_{2d}和 D_{4d}的元素.

D_{2d}: $\{e, C_4^{(2)}, C_2^{(1)}, C_2^2, S_4, S_4^3, \sigma_d^{(1)}, \sigma_d^{(2)}\}$

D_{4d}: $\{e, C_8^2 = C_4, C_8^4 = C_4^2, C_8^6 = C_4^3, C_2^{(1)},$
$C_2^{(2)}, C_2^{(3)}, C_2^{(4)}, \sigma_d^{(1)}, \sigma_d^{(2)}, \sigma_d^{(3)}, \sigma_d^{(4)}, S_8, S_8^3, S_8^5, S_8^7\}$

(ii) 第二类点群 $D_{(2m+2)h}$

$D_{2(2m+1)}$群存在 $2(2m+1)$阶的子群 D_{2m+1}. 因而群 $D_{2(2m+1)}$的元素除子群 D_{2m+1}的元素外，则为 D_{2m+1}的陪集，对这个陪集乘 i，则得到一个第二类点群，它们为

$$iC_{2(2m+1)}D_{2m+1} = \{iC_{2(2m+1)}^{2k+1}, k = 0, 1, 2, \cdots, 2m, k \neq m;$$
$$\sigma_h, \sigma_d^{(p)}, p = 1, 2, \cdots, (2m+1)\}$$

于是得到与 $D_{2(2m+1)}$群同构的第二类点群，称为 $D_{(2m+1)h}$群. 这类群以存在垂直于 $(2m+1)$重轴的反射面 σ_h 为特征.

容易证明 $D_{(2m+1)h}$群实质上是 $D_{(2m+1)}$群与反射群 $C_s = \{e, \sigma_h\}$的直积群，即

$$D_{(2m+1)h} = D_{(2m+1)} \otimes C_s$$

$$D_{(2m+1)} \otimes C_s = \{C_{2m+1}^k, C_2^{(k)}, \sigma_h C_{2m+1}^k, \sigma_h C_2^{(k)}, k = 1, 2, \cdots, 2m+1\}$$

$\sigma_h = iC_2$，C_2 轴平行 C_{2m+1}轴. 因而

$$\sigma_h C_{2m+1}^k = iC_{2(2m+1)}^{2m+1+2k}$$

这表明 $\sigma_h C_{2m+1}^k$随 k 变化给出了全部的 $iC_{2(2m+1)}^{2k+1}$，　$p = 0, 1, 2, \cdots, 2m$，另一方面，$C_2^{(k)}$的轴垂直 C_{2m+1}轴，因而

$$\sigma_h C_2^{(k)} = iC_2 C_2^{(k)} = iC_2^{(p)} = \sigma_d^{(p)}$$

$\sigma_d^{(p)}$ 的法线与 $C_2^{(k)}$ 轴相垂直相交于 C_{2m+1}轴，因而随 k 变化得到了全部 $2m+1$ 个反射面

$\sigma_d^{(p)}$. 因而两种元素集合是相同的，即

$$\{\sigma_h C_{2m+1}^k, \sigma_h C_2^{(k)}\}$$
$$= \{iC_{2(2m+1)}^{2k+1}, k = 0, 1, 2, \cdots, 2m; \sigma_d^{(p)}, p = 1, 2, \cdots, 2m+1\}$$

这就证明了与 $D_{2(2m+1)}$ 群同构的第二类点群 $D_{(2m+1)h}$ 是一个直积群.

在图 2.4.2 中给出了 D_{2d}, D_{3d} 和 D_{3h} 群的对称元素.

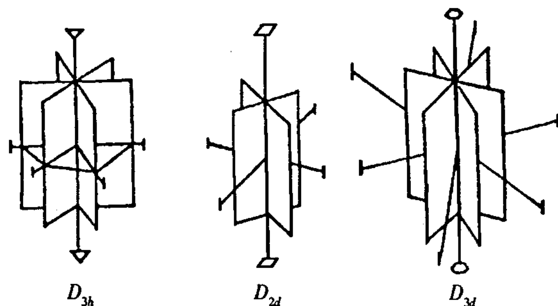


图 2.4.2 D_{2d}, D_{4d} 和 D_{3h} 的对称元素

3. 与 O 群同构的第二类点群 T_d

O 群存在一个 12 阶的不变子群 T, T 的元素为

$$T = \{e, C_4^{(1)^2} = C_2^{(1)}, C_4^{(2)^2} = C_2^{(2)}, C_4^{(3)^2} = C_2^{(3)},$$
$$C_3^{(1)}, C_3^{(2)}, C_3^{(3)}, C_3^{(4)}, C_3^{(1)^2}, C_3^{(2)^2}, C_3^{(3)^2}, C_3^{(4)^2}\}$$

O 群中其它元素为群 T 的陪集.

$$C_4^p T = \{C_4^{(1)}, C_4^{(1)^3}, C_4^{(2)}, C_4^{(2)^3}, C_4^{(3)}, C_4^{(3)^2}, C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}, C_2^{(4)}, C_2^{(5)}, C_2^{(6)}\}$$

当以 iC_4 代替 C_4 时，元素集合为

$$iC_4 T = \{S_4^{(1)^3}, S_4^{(1)}, S_4^{(2)^3}, S_4^{(2)}, S_4^{(3)^2}, S_4^{(3)}, \sigma_d^{(1)}, \sigma_d^{(2)}, \sigma_d^{(3)}, \sigma_d^{(4)}, \sigma_d^{(5)}, \sigma_d^{(6)}\}$$

因而得到 T_d 群为

$$T_d = T \oplus iC_4 T$$
$$= \{e, C_2^{(k)}, k = 1, 2, 3; C_3^{(k)}, C_3^{(k)^2}, k = 1, 2, 3, 4;$$
$$C_2'^{(k)}, k = 1, 2, \cdots, 6; S_4^{(k)}, S_4^{(k)^3}, k = 1, 2, 3; \sigma_d^{(k)}, k = 1, 2, \cdots, 6\}$$

它同构于 O 群.

在图 2.4.3 中给出了 T_d 群的对称元素. 图中 a, b, c, d 为正四面体(即 T 群)的四个顶点. 图中只给出了一个 $C_4^2 = C_2$ 和相应的 S_4，如果取它为 z 轴，另两个二重轴 $C_2^{(2)}$, $C_2^{(3)}$ (和相应的四重转动反射轴 $S_4^{(2)}$, $S_4^{(3)}$)分别为 y 轴和 z 轴. 6 个反射面为 x-y 面, x-z 面, y-z 面, 以及另三个包括立方体对角线的平面, 图中没有画出这些反射面.

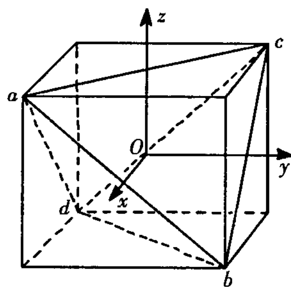


图 2.4.3 T_d 群的对称元素

由上述讨论可看到不包括反演 i 的第二类点群

具有形式

$$G^* = K \oplus igK \simeq G$$

K 为 G 群的1/2 阶的不变子群，$g \in G$，$g \notin K$，gK 为 G 群的陪集，G^* 群由两个元素集合 K 和 igK 之和构成，亦即 G^* 为集合 K 和 igK 的并集，因而可写为

$$G^* = K \cup igK \simeq G, \quad K \subset G$$

其中包括两类直积群，即

$$D_{2md} = D_{2m} \otimes C_s = D_{2m} \cup i\mathscr{C}_{4m} D_{2m} \simeq D_{4m}$$

$$\mathscr{C}_{(2m+1)h} = \mathscr{C}_{2m+1} \otimes C_s = \{\mathscr{C}_{2m+1}\} \cup i\mathscr{C}_{2(2m+1)}\{\mathscr{C}_{2m+1}\} \simeq \mathscr{C}_{2(2m+1)}$$

2.5　点群完备性的证明

按定义点群是 $O(3)$ 群的有限子群，在2.3 和2.4 中得到的点群是不是 $O(3)$ 群的全部有限子群呢？$O(3)$ 群还存在不存在其它有限子群？显然这是一个需要讨论的问题. 下面证明 $O(3)$ 群除了前面讨论有限子群外，不存在其它有限子群，或者说2.3 和2.4 节给出的点群是完备的.

2.5.1　第二类点群的性质

如果 G^+ 是第二类点群，它包括行列式为1 的纯转动元素，又包括行列式为 (-1) 的非纯转动元素. 而其中纯转动元素构成一个子群 K，如果

$$g_i, g_j \in K, \quad \det g_i = \det g_j = 1$$

则

$$\det(g_i g_j) = 1$$

这便保证了 K 群中纯转动元素之间乘法的封闭性. 因而任何第二类点群 G^+ 都包括子群 K，K 是第一类点群. 而且子群 K 还是不变子群，因为它包括了大群 G^+ 中由纯转动组成的全部共轭类. 因而第二类点群 G^+ 一定可分解为子群(第一类点群)K 的陪集之和，即

$$G^+ = K \oplus \sum_i g_i K$$

另一方面，显然第二类点群 G^+ 与反演群 $I = \{e, i\}$ 同态. 这种同态关系为

$$G^+ \to I$$

$$\{k_i, \det k_i = 1\} \to e$$

$$\{g_i, \det g_i = -1\} \to i$$

即 G^+ 群中全部纯转动元素 $k_i(\det k_i = 1)$ 对应于 I 群的单位元 e，全部非纯转动的元素 g_i $(\det g_i = -1)$ 对应于 i. 而且

$$k_i k_j = k_l \to ee = e$$

$$g_i k_j = g_l \to ie = i$$

$$g_i g_j = k_l \to ii = e$$

如果子群 K 的阶为 m，根据同态核定理，G^+ 群的阶为 $2m$.

这就证明第二类点群 G^+ 存在一个1/2 阶的由纯转动构成的不变子群 K，是第二类

点群的普遍性质. 因而 G^+ 对不可变子群 K 的陪集分解一定是

$$G^+ = K \oplus g_i K,\ \det g_i = -1$$

可以把上述讨论的结果归纳为关于第二类点群的一条定理.

定理 2.5.1 任何第二类点群 G^+ 的阶数 n 为偶数, $n=2m$; G^+ 的元素一定包括 m 个纯转动元素和 m 个非纯转动, m 个纯转动构成 G^+ 的不变子群 K; G^+ 按 K 的陪集分解为

$$G^+ = K \oplus gK, \quad \det g = -1$$

这个定理揭示了第二类点群的普遍性质.

由这个定理可得到第二类点群可分为两种类型. 一种是第二类点群 G^+ 中包括反演元素, 在这种情况下, 陪集分解变为

$$G^+ = K \oplus iK = K \otimes I$$

即第二类点群中如果存在反演 i, 它一定是 m 阶第一类点群 K 与反演群 I 的直积群.

第二种类型是第二类点群 G^+ 中不包括反演元素 i, 此时 G^+ 的陪集分解为

$$G^+ = K \oplus g_i K, \quad \det g_i = -1,\ g_i \neq i$$

如果以 k_i, $i=1, 2, \cdots, m$ 代表子群 K 的元素

$$g_i k_j = g_l, \quad \det g_l = -1$$

由于 k_j 均为纯转动, $g_i k_j$ 不可能是 i.

现在以 ig_i 代替 g_i, 由于 $\det(ig_i)=1$, 因而 ig_i 变为纯转动, 于是元素集合

$$K \oplus ig_i K$$

全部为纯转动, 与 2.3.2 节中的讨论相似, 可以证明, 它们构成 $2m$ 阶的第一类点群, 记为 G. 这个 $2m$ 阶的第一类点群 G 与第二类点群 G^+ 同构. 子群 K 也是第一类点群 G 的不变子群.

这说明对于 2.3 节得到的第一类点群, 2.4 节中已全部找到了与它们有关的第二类点群. 因而 2.3 和 2.4 节讨论的点群是否完备的问题, 就归结为 2.3 节中给出的第一类点群是不是穷尽了 $SO(3)$ 群的所有有限子群, 也就是 2.3 节给出的第一类点群对于 $SO(3)$ 群是不是完备的问题.

2.5.2 $SO(3)$ 群的所有可能的有限子群

为了找到 $SO(3)$ 群所有可能的有限子群, 即全部第一类点群, 首先讨论迷向子群(isotropy subgroup)和群的轨迹(trajectory).

1. 迷向子群与群的轨迹

空间变换群 G, 它的元素 g_i 作用于空间向量 x 使之变为 x', 即

$$g_i x = x'$$

当然也存在元素 g_p, 使 x 保持不变, 即

$$g_p x = x$$

称 g_p 为保持 x 不变的元素, 由此可定义迷向子群.

定义 2.5.1 空间变换群 G 中保持向量 x 不变的元素集合

$$\{g \in G \mid gx = x\}$$

构成 G 的一个子群, 称为 x 点的迷向子群, 记为 G^x.

显然这种定义的元素集合构成一个子群，因为单位元作用任何一点都保持这个点不动，因而集合 G^x 中包括单位元. 若元素 g 使 x 不变，即 $gx=x$，则以 g^{-1} 作用之，得到

$$x=g^{-1}x$$

因而使 x 不变的集合中包括保持 x 不变的每个元素的逆. 显然若 $gx=x$，$g'x=x$，则 $gg'x=x$. 这说明 $gg'\in G^x$，即集合 G^x 中的元素是封闭的，这就证明了 G^x 是 G 的子群.

例如 D_3 群，它的元素为

$$\left\{E,\ C_z\left(\frac{2\pi}{3}\right),\ C_z\left(\frac{4\pi}{3}\right),\ C_A(\pi),\ C_B(\pi),\ C_C(\pi)\right\}$$

$C_A(\pi)$，$C_B(\pi)$，$C_C(\pi)$ 分别为通过正三角形三个顶点的二重转动，保持 A 点不动的迷向子群

$$G^A=\{E,\ C_A(\pi)\}$$

保持 B、C 点不动的迷向子群分别为

$$G^B=\{E,\ C_B(\pi)\}$$

$$G^C=\{E,\ C_C(\pi)\}$$

一个 n 阶的变换群，群元素 $g_1, g_2, \cdots, g_n$ 作用于空间一点 x_1，使之变为 $x_1, x_2, \cdots, x_K$，这 K 个点称为通过 x_1 点的群的轨迹. 因为若干元素作用于 x_1 保持不变，故此轨迹上点的数目 $K<n$.

下面给出迷向子群及其陪集与群的轨迹间的关系的定理. 这个定理把通过点 x 的轨迹上的点与迷向子群 G^x 及其陪集一一对应起来了. 因而对分析点群的结构十分重要.

定理 2.5.2　若群 G 是 n 阶变换群，G^x 是保持点 x 不变的迷向子群，则 G^x 的每一个左陪集作用于点 x 后，把 x 点变换为通过 x 点的轨迹上的一个点 y，也就是陪集中每一个元素都把点 x 变换为同一个点 y. 而且把点 x 变换为 y 的全部元素构成迷向子群 G^x 的一个陪集.

证明　迷向子群 G^x 和它的左陪集为

$$G^x=\{g\in G\mid gx=x\}$$

$$fG^x=\{fg\mid g\in G^x, f\in G, f\notin G^x\}$$

因而

$$gx=x,\ (fg)x=fx=y$$

上式对 G^x 中全部元素均成立，这就证明了左陪集 $fG^x=\{fg,\ g\in G^x\}$，把 x 变为同一个点 y，反之若 f 和 p 都把点 x 变为点 y，即

$$fx=px=y$$

则以 p^{-1} 乘上式，得到

$$(p^{-1}f)x=x=p^{-1}y$$

这说明 $p^{-1}f\in G^x$，因而 $f\in pG^x$，即 f 为左陪集 pG^x 中的一个元素. 从而证明了这个定理.

由这个定理可得到下面的一个推论.

推论　对任意 n 阶变换群 G，它的迷向子群 G^x 的左陪集的数目等于通过点 x 的轨迹上点的数目，若 G^x 的阶为 n_x，则通过 x 的轨迹上有 n/n_x 个点.

例　D_3 群. 迷向子群 $G^A=\{E,\ C_A(\pi)\}$，它的左陪集为

$$C_B(\pi)G^A = \{C_B(\pi), C_Z(4\pi/3)\}$$
$$C_C(\pi)G^A = \{C_C(\pi), C_Z(2\pi/3)\}$$

因而

$$C_B(\pi)G^A A = C, \quad C_C(\pi)G^A A = B$$

通过 A 点的轨迹有 $\frac{6}{2}=3$ 个点.

2. *第一类点群轨迹所满足的基本方程*

第一类点群是由相交于原点的若干个旋转轴构成的. 由于绕不同轴的转动之间一定遵循乘法规律，群的封闭性对这个转动轴给出了制约，这种制约表现为下面的第一类点群轨道的基本方程，由这个方程可求解出全部的第一类点群.

以原点为球心，做一个单位球，第一类点群 G 把球面上的一点仍然变换为球面上的另一个点. 设 G 中存在一个 n_i 重旋转轴，这个轴与球面相交于 $\boldsymbol{r}_i$ 和 $-\boldsymbol{r}_i$，称这些点为极点. 这个轴所产生的转动元素为

$$C_{r_i}\left(\frac{2\pi}{n_i}\right), \quad C_{r_i}\left(\frac{2\pi}{n_i}\right)^2, \quad \cdots, \quad C_{r_i}\left(\frac{2\pi}{n_i}\right)^{n_i-1}, \quad C_{r_i}\left(\frac{2\pi}{n_i}\right)^{n_i} = E$$

它们构成群 G 的一个子群，绕 $\boldsymbol{r}_i$ 的全部转动保持 $\boldsymbol{r}_i$ 不变，是 $\boldsymbol{r}_i$ 点的迷向子群 G^{r_i}，这个迷向子群为

$$\left\{C_{r_i}\left(\frac{2\pi}{n_i}\right)^k, k = 1, 2, \cdots, n_i\right\}$$

根据定理 2.5.2 通过 $\boldsymbol{r}_i$ 的轨迹上的点与迷向子群 G^{r_i} 的陪集一一对应，即通过 $\boldsymbol{r}_i$ 的轨迹上有 $\frac{n}{n_i}$ 个点，n 为点群 G 的阶数.

取轨迹上的另一个点

$$\boldsymbol{r}_i' = g\boldsymbol{r}_i, \quad g \in G, \ g \notin G^{r_i}$$

它是在群元素 g 作用下把 $\boldsymbol{r}_i$ 变为轨迹上的另一点. 容易看到

$$(gG^{r_i}g^{-1})\boldsymbol{r}_i' = \boldsymbol{r}_i' = g\boldsymbol{r}_i$$

这说明子群 $\{gG^{r_i}g^{-1}\}$ 是点 $\boldsymbol{r}_i'$ 的迷向子群 $G^{r_i'}$，$G^{r_i'}$ 与 G^{r_i} 互为共轭子群，即 $G^{r_i'}$ 群的元素由 G^{r_i} 的元素的共轭元素构成，因而 $G^{r_i'}$ 与 G^{r_i} 同构，它是以 $\boldsymbol{r}_i'$ 为轴的 n_i 重旋转群. 由于通过 $\boldsymbol{r}_i$ 的轨迹上有 $\frac{n}{n_i}$ 个点，因而共产生 $\frac{n}{n_i}$ 个 n_i 重旋转轴，这些旋转轴在单位球面上共有 $2\frac{n}{n_i}$ 极点，它们构成两条群轨迹. 迷向子群 G^{r_i} 的 $\frac{n}{n_i}$ 个陪集把 $\boldsymbol{r}_i$ 在它的轨道上变换取遍 $\frac{n}{n_i}$ 个点 $\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i', \cdots$，构成一条轨迹. 同时把极点 $(-\boldsymbol{r}_i)$ 也在它的轨迹上取遍 $\frac{n}{n_i}$ 个点，构成另一条轨迹. 第一个轨迹包括了 $\frac{n}{n_i}$ 个 n_i 重轴 的极点 $\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i', \cdots$，第二个轨迹包括 $\frac{n}{n_i}$ 个 n_i 重轴的极点 $(-\boldsymbol{r}_i), (-\boldsymbol{r}_i'), (-\boldsymbol{r}_i''), \cdots$.

如果群 G 还存在一个 n_j 重轴，它也给出了如上讨论的轨迹和其它 n_j 重轴.

每个 n_i 重轴给出 (n_i-1) 个不包括单位元的群元素，$\frac{n}{n_i}$ 个 n_i 重轴给出 $\frac{n}{n_i}(n_i-1)$ 个不包括单位元的群元素. 这些不包括单位元的群元素对应于两个轨迹，因而每个轨迹对应于 $\frac{n}{2n_i}(n_i-1)$ 个群元素，如果 n 阶群 G 共存在 l 个不同重数的旋转轴构成的轨迹，则群的阶数 n 满足下面的方程，即

$$\sum_{i=1}^{l}\frac{n}{2n_i}(n_i-1)=n-1 \quad 或 \quad \sum_{i=1}^{l}\left(1-\frac{1}{n_i}\right)=2\left(1-\frac{1}{n}\right) \tag{2.5.1}$$

l 等于群 G 的轨迹数.

方程(2.5.1)中 n 为任意正整数，n_i 最小为二重轴，因而 $n\geqslant n_i\geqslant 2$，则(2.5.1)中每一个满足这些条件的正整数解 n_1，n_2，…，n_k，就给出了一种第一类点群. 方程(2.5.1)为第一类点群轨迹满足的基本方程.

通过计算可以证明方程(2.5.1)满足条件 $n\geqslant n_i\geqslant 2$ 的正整数解只有 $l=2$ 和 $l=3$ 时才存在.

当 $l=2$ 时，方程(2.5.1)变为

$$\frac{2}{n}=\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2} \tag{2.5.2}$$

其解为 $n_1=n_2=n$，即群 G 在单位球面上的极点为群 G 的两个轨迹，存在一个 n 重轴 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{r}$ 在单位球面上有两个交点 $\boldsymbol{r}$，$-\boldsymbol{r}$，通过群元素的作用形成通过 $\boldsymbol{r}$ 和 $-\boldsymbol{r}$ 群的两个轨迹. 因而群 G 为一个 n 重旋转轴构成 n 重单轴群，即为 $\mathscr{C}_n$，元素为

$$\mathscr{C}_n=\left\{C_r\left(\frac{2\pi}{n}\right),\ C_r\left(\frac{2\pi}{n}\right)^2,\ \cdots,\ C_r\left(\frac{2\pi}{n}\right)^n=E\right\}$$

当 $l=3$ 时，方程(2.5.1)变为

$$1+\frac{2}{n}=\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}+\frac{1}{n_3} \tag{2.5.3}$$

令 $n_1\leqslant n_2\leqslant n_3$，要求满足条件 $2\leqslant n_1\leqslant n_2\leqslant n_3\leqslant n$. 可以证明 $n_1\geqslant 3$ 时，(2.5.3)没有正整数解，因此 n_1 只能为2，即 $n_1=2$，于是方程(2.5.3)变为

$$\frac{2}{n}+\frac{1}{2}=\frac{1}{n_2}+\frac{1}{n_3} \tag{2.5.4}$$

此时 $n_2\geqslant 4$，方程无正整数解，因而只能 $n_2=2$，$n_2=3$. 于是得到四类解，即

(i) $n_1=n_2=2$

方程(2.5.4)为 $\frac{2}{n}=\frac{1}{n_3}$，即 $n_3=\frac{n}{2}=m$，n 为偶数，称这类群即为二面体群 D_m，群的阶为 $2m=n$.

(ii) $n_1=2$，$n_2=3$

方程(2.5.4)为

$$\frac{2}{n}=\frac{1}{n_3}-\frac{1}{6}$$

它存在三种正整数解，这三种解为:

(1) $n_1=2$, $n_2=3$, $n_3=3$, $n=12$

(2) $n_1=2$, $n_2=3$, $n_3=4$, $n=24$

(3) $n_1=2$, $n_2=3$, $n_3=5$, $n=60$

由这些解所求出的极点，分别构成5种柏拉图图形的顶点，即解(1)对应正四面体；解(2)对应于正立方体或正八面体；解(3)对应于十二面体或二十面体. 分别称这些群为四面体群(T群)，八面体群(O群)，二十面体群(I群). 立方体的内接多面体是正八面体，因此这两种多面体具有相同对称性，它们属于一个对称群O群，正十二面体的内接多面体是正二十面体，因而它们具有相同的对称性，均为I群(或记为K群)的对称性.

这就证明了2.2节所讨论的第一类点群穷尽了$SO(3)$群的所有有限子群.

2.6 晶体学点群与描述分子对称性的连续群

本章已讨论了描述有限对称性形体的全部可能的点群，它们对描述分子对称性和晶格对称性有重要意义. 但是这些点群不能描述最简单的线性分子的对称性，只有把一些点群推广到连续群才能描述全部分子的可能的对称性，除在前面所讨论的点群之外，再加上描述线性分子的连续群，称为分子对称群. 理想晶体是由具有一定对称性的晶格通过在特定方向上的平移而得到的. 因而这些晶格的对称性一定受到平移的制约，只有那些平移后能充满整个空间的对称的形体才能构成晶格. 因而可以描述晶格对称性的点群只能是前面讨论的点群中的一部分，这部分点群称为晶体学点群. 在这节中就来讨论这些问题.

2.6.1 由点群推广而得到的连续群

对于群C_n，当$n\to\infty$时，变为连续群，它的元素为

$$C_a\left(\frac{2\pi}{n}\right)\xrightarrow{n\to\infty}C_a(\alpha),\quad 0\leqslant\alpha<2\pi$$

这是包括一个参数α的连续群，也就是二维旋转群$SO(2)$. 由于

$$C_a(\alpha)C_a(\beta)=C_a(\beta)C_a(\alpha)=C_a(\alpha+\beta)$$

因而是Abel群，称为C_∞群，这个群的元素为$\{E,\ C_a(\alpha),\ 0\leqslant\alpha<2\pi\}$.

于此相似，当$n\to\infty$时，C_{nv}推广为$C_{\infty v}$，这个群的元素为

$$C_{\infty v}=\{E,\ C_a(\alpha),\ \infty\sigma_v\}$$

这个群不仅包括可任意转动角度α的旋转轴$\boldsymbol{a}$，而且有无穷多个相交于$\boldsymbol{a}$的反射面σ_v. 反射面的存在使$\boldsymbol{a}$为双向轴，即$C_a(\alpha)=C_a(-\alpha)^{-1}$，$C_a(\alpha)$与$C_a(-\alpha)$为共轭元素.

$C_{\infty v}$可描述多原子构成的线性分子的对称性.

当$n\to\infty$时，D_{nh}推广为$D_{\infty h}$，它的元素为

$$D_{\infty h}=\{E,\ C_a(\alpha),\ \infty C_b(\pi),\ I,\ \infty\sigma_v,\ IC_a(\alpha)\}$$

$\boldsymbol{a}$为旋转轴，$\boldsymbol{b}\perp\boldsymbol{a}$为二重轴，$\sigma_v=IC_b(\pi)$也有无穷多个，$\sigma_h$为$IC_b(\pi)=\sigma_h$.

$D_{\infty h}$描述直线中点两边对称分布若干原子的线性分子的对称性.

2.6.2　晶体学点群

晶体中存在三个晶轴 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$，它们是线性无关的，可构成晶体中的一组基矢. 晶体中任一格点 $\boldsymbol{R}$ 总可写为

$$\boldsymbol{R}=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3=(n_1,\ n_2,\ n_3)\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix} \tag{2.6.1}$$

其中 $n_i=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots$，(正负整数). 如果晶格具有点群 G 的对称性，则在 G 群元素 g 的作用下，格点 $\boldsymbol{R}$ 变为另一个格点 $\boldsymbol{R}'$，即

$$g\boldsymbol{R}=(n_1,\ n_2,\ n_3)D(g)\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\boldsymbol{R}'=(n_1',\ n_2',\ n_3')\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}$$

$$n_i'=\sum_j D_{ji}(g)n_j,\quad i=1,2,3 \tag{2.6.2}$$

其中 $D(g)$ 为群元素 g 在晶格坐标系($\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$)中的表示矩阵. 由于 n_i' 必须是正负整数或0. 因而在晶格坐标系中表示矩阵的矩阵元也必须是正负整数或0.

另一方面，点群 G 是正交群 $O(3)$ 的子群，因而 G 群的元素 g 只能是

$$C_k(\alpha)\text{或}\ iC_k(\alpha)$$

由(2.1.8)式可看到

$$\mathrm{tr}C_k(\alpha)=(1+2\cos\alpha) \tag{2.6.3}$$

由此得到

$$\mathrm{tr}D(g)=\pm(1+2\cos\alpha),\quad |\mathrm{tr}D(g)|\leqslant 3\quad(\cos\alpha\ \text{的最大值为}\ 1) \tag{2.6.4}$$

而且 $D(g)_{ij}$ 还要是正负整数或0. 因而转角 α 只能是 $0,\ \frac{\pi}{2},\ \frac{\pi}{3},\ \frac{2\pi}{3},\ \pi$. 因此在晶体学点群中只有一重轴、二重轴、三重轴、四重轴和六重轴，以及相应的转动反演轴.

注意晶格坐标系 $\{\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_3\}$ 不一定是正交系，更不是归一化的，不同方向的晶格长度不一样，不能归一化. 因而在晶轴坐标系转动矩阵不具有如正交归一化的直角坐标系中的形式.

晶体平移条件限制，使晶体点群只能存在转角为 $0,\ \frac{\pi}{2},\ \frac{\pi}{3},\ \frac{2\pi}{3}$ 四种，这也可以从宏观上看出，即只有长方形、正方形、正三角形和正六边形才能铺满整个平面. 也只有这些面所构成的多面体，紧密堆积在一起才能充满整个空间. 因而只有描述这些多面体对称性的点群才能是晶体学点群. 比如正十二面体，它包括正五边形的表面，而正五边形是不能紧密地铺满整个平面的，因而晶体学点群不包括 K 群和 K_h 群.

在这种约束下，晶体学点群只有32个：

$$C_1,\ C_2,\ C_3,\ C_4,\ C_6,\ D_2,\ D_3,\ D_4,\ D_6,\ T,\ O,\ I,\ C_s,$$
$$C_{2h},\ C_{3h},\ C_{4h},\ C_{6h},\ C_{2v},\ C_{3v},\ C_{4v},\ C_{6v},\ S_4,\ S_6,$$
$$D_{2h},\ D_{3h},\ D_{4h},\ D_{6h},\ D_{2d},\ D_{3d},\ T_d,\ T_h,\ O_h$$

2.7 点群小结

为了对点群有一个概要的了解，下表列出了第一类点群及其主要性质.

第一类点群

第一类点群	阶	元素	类数	类	$\frac{1}{2}$阶的不变子群
$\mathscr{C}_{2m}$	$2m$	C_{2m}^k, $k=1,2,\cdots,2m$	$2m$	$\{C_{2m}^k\}$, $k=1,2,\cdots,2m$	$\mathscr{C}_m$
$\mathscr{C}_{2m+1}$	$2m+1$	C_{2m+1}^k, $k=1,2,\cdots,2m+1$	$2m+1$	$\{C_{2m+1}^k\}$, $k=1,2,\cdots,2m+1$	无
D_{2m}	$4m$	$C_2^{(k)}$, C_{2m}^k, $k=1,2,\cdots,2m$	$m+3$	$\{C_2^{(k)}, k=1,3,5,\cdots,2m-1\}$ $\{C_2^{(k)}, k=2,4,6,\cdots,2m\}$ $\{C_{2m}^k, C_{2m}^{2m-k}\}$ $k=1,2,\cdots,m-1$ $\{C_{2m}^m\}$, $\{E\}$	D_m $\mathscr{C}_{2m}$
D_{2m+1}	$2(2m+1)$	$C_2^{(k)}$, C_{2m+1}^k $k=1,2,\cdots,2m+1$	$m+2$	$\{C_2^{(k)}, k=1,2,\cdots,2m+1\}$ $\{C_{2m+1}^k, C_{2m+1}^{2m+1-k}\}$, $k=1,2,\cdots,m$ $\{E\}$	$\mathscr{C}_{2m+1}$
T	12	$C_2^{(i)}$, $i=1,2,3$ $C_3^{(i)k}$, $i=1,2,3,4$, $k=1,2$ E	4	$\{C_2^{(i)}, i=1,2,3\}$ $\{C_3^{(i)}, i=1,2,3,4\}$ $\{C_3^{(i)2}, i=1,2,3,4\}$ $\{E\}$	无
O	24	$C_2^{(i)}$, $i=1,2,\cdots,6$ $C_3^{(i)k}$, $i=1,2,3,4$, $k=1,2,3$ $C_4^{(i)k}$, $i=1,2,3$, $k=1,2,3$ E	5	$\{C_2^{(i)}, i=1,2,\cdots,6\}$ $\{C_3^{(i)k}, i=1,2,3,4\ k=1,2\}$ $\{C_4^{(i)k}, i=1,2,3, k=1,3\}$ $\{C_4^{(i)2}=C_2^{(i)}, i=1,2,3\}$ $\{E\}$	T
K	60	$C_2^{(i)}$, $i=1,2,\cdots,15$, $C_3^{(i)k}$, $i=1,2,\cdots,10$, $k=1,2$ $C_5^{(i)k}$, $i=1,2,\cdots,6$, $k=1,2,3,4$ E	5	$\{C_2^{(i)}, i=1,2,\cdots,15\}$ $\{C_3^{(i)k}, i=1,2,\cdots,10, k=1,2\}$ $\{C_5^{(i)k}, i=1,2,\cdots,6, k=1,4\}$ $\{C_5^{(i)k}, i=1,2,\cdots,6, k=2,3\}$ $\{E\}$	无
C_∞	∞	$C_z(\alpha)$	∞	$\{C_z(\alpha)\}$	无
D_∞	∞	∞C_2, $C_z(\alpha)$	∞	$\{\infty C_2\}\{C_z(\alpha), C_z(-\alpha)\}$	

第二类点群分为直积群 $G\otimes I$ 和与第一类点群 G 同构的第二类点群 $G^+=K\cup iK'$，其中 K 为 G 的 1/2 阶的不变子群，K'为不变子群 K 的陪集. 下面用两个简表给出它们.

由直积群构成的第二类点群

第二类点群	结构	阶	类数	基本元素
I	$\mathscr{C}_1 \otimes I$	2	2	E, I
$S_{2(2m+1)}$	$\mathscr{C}_{2m+1} \otimes I$	$2(2m+1)$	$2(2m+1)$	E, C_{2m+1}, I 和 $S_{2(2m+1)}$
C_{2mh}	$\mathscr{C}_{2m} \otimes I$	$4m$	$4m$	E, C_{2m}, C_2, I, σ_h, S_{2m}
D_{2mh}	$D_{2m} \otimes I$	$8m$	$2(m+3)$	E, C_{2m}, C_2, I, σ_h, S_{2m}, S_m
$D_{(2m+1)}d$	$D_{2m+1} \otimes I$	$4(2m+1)$	$2m+2$	E, C_{2m+1}, C_2, I, σ_d, S_{2m+1}
T_h	$T \otimes I$	24	8	E, C_2, C_3, I, S_6, σ_h
O_h	$O \otimes I$	48	10	E, C_2, C_3, C_4, I, σ_h, σ_d, S_6, S_4
K_h	$K \otimes I$	120	10	E, C_2, C_3, C_5, I, σ, S_5, S_{10}
$D_{\infty h}$	$D_\infty \otimes I$	∞	∞	E, C_2, $C_z(\alpha)$, σ_h

与第一类点群 G 同构的第二类点群

第二类点　群	结构	阶	同构的第一类点群	类数	基本元素
C_s	$C_1 \cup iC_2$	2	C_2	2	E, σ
S_{4m}	$C_{2m} \cup i\{C_{4m}^{2k-1}\}$	$4m$	C_{4m}	$4m$	E, S_{4m}
$C_{(2m+1)h}$	$C_{2m+1} \otimes C_s$	$2(2m+1)$	$C_{2(2m+1)}$	$2(2m+1)$	E, C_{2m+1}, σ, $S_{2(2m+1)}$
D_{2md}	$D_{2m} \otimes C_s$	$8m$	D_{4m}	$2m+3$	E, C_2, C_{4m}, S_{4m}, σ
$D_{(2m+1)h}$	$D_{(2m+1)} \otimes C_s$	$4(2m+1)$	$D_{2(2m+1)}$	$2(m+2)$	E, C_2, $C_{2(2m+1)}$, σ, $S_{2(2m+1)}$
C_{mv}	$\mathscr{C}_m \cup iK_2$	$2m$	D_m	N	E, C_2, C_{2m}, σ, S_{2m}
T_d	$T \cup iK_3$	24	O	5	E, C_2, C_3, C_4, σ, S_6, S_4

注：表中 K_i 分别为与之同构的第一类点群的1/2 阶不变子群的陪集. C_{mv}群的类数 N，当 $m=2n+1$ 时，$N=n+2$；当 $m=2n$ 时，$N=n+3$.

所有晶体按晶格平移向量可分为七类，称为七个晶系. 在下表按七个晶系列出了 32 个点群.

晶体学点群按晶系分类

晶　系	点　群
三斜系	C_1, I
单斜系	C_1, C_s, C_{2h}
正交系	D_2, C_{2v}, D_{2h}
三角系	C_3, D_3, C_{3h}, D_{3h}, S_6
四角系	C_4, C_{4h}, C_{4v}, D_4, D_{4h}, S_4, D_{2h}
六角系	C_6, C_{6h}, C_{6v}, D_6, D_{6h}, C_{3h}, D_{3h}
立方系	T, O, T_h, T_d, O_h

下表给出了柏拉图多面体的图形.

柏拉图多面体图形

正多面体图形	符号	名　称	表　面	顶角数	棱边数
	T	正四面体	4 个等边三角形	4	6
	O	立方体	6 个正方形	8	12
	O	正八面体	8 个正三角形	6	12
	I	正五角十二面体	12 个正五边形	20	30
	I	正三角二十面体	20 个正三角形	12	30

晶体学点群有两种符号：一种是前面使用的 Schoenflies 符号(简称 Sch 符号)；另一种国际符号或称为 Hermann-Mauguin 符号(简称 H-M 符号). 国际符号的优点是明确标记出这个点群的主要操作的性质. 下表列出了点群对称操作的 Sch 记号和国际符号.

点群操作的两种符号

对称操作	国际符号	Sch 符号
对称中心	$\bar{1}$	C_i
对称面	m	C_s
一重转轴	1	C_1
二重转轴	2	C_2
三重转轴	3	C_3
四重转轴	4	C_4
六重转轴	6	C_6
二重转动反射轴	$\bar{2}(=m)$	$S_2 = C_s$
三重转动反射轴	$\bar{3}$	S_3
四重转动反射轴	$\bar{4}$	S_4
六重转动反射轴	$\bar{6}\left(=\frac{3}{m}\right)$	S_6

在国际符号中明确标志出了这个点群的主要元素，如 C_{2h} 群，国际符号为 $\frac{2}{m}$，表示有一个二重轴和垂直于这个轴的反射面 m，m 设在分母上均表示垂直于分子上的轴的反射

面. 比如 O 群国际符号为 432，代表存在四重轴、三重轴和二重轴. 而 O_h 群利用包括这些轴的反射面代替轴的标号，于是 O_h 群的国际符号为 $m3m$，表明有两类不同的反射面（一类包括四重轴；一类包括二重轴）和主轴. 虽然国际符号比 Sch 符号麻烦，但它比较明确地指出了这个群的主要对称元素.

下表给出了 32 个晶体学点群的两种符号

32 个晶体学点群的两种符号

Sch 符号	C_1	C_i	C_{2h}	C_2	C_s	D_{2h}	D_2	C_{2v}	D_{3h}	D_3	C_{3v}	S_6
国际符号	1	$\bar{1}$	$\frac{2}{m}$	2	m	mmm	222	$2mm$	$\bar{6}2m$	32	$3m$	$\bar{3}$

Sch 符号	C_3	D_{4h}	D_4	C_{4v}	C_{4h}	D_{2d}	S_4	C_4	D_{6h}	D_6
国际符号	3	$\frac{4}{m}mm$	422 （或 42）	$4mm$	$\frac{4}{m}$	$\bar{4}2m$	$\bar{4}$	4	$\frac{6}{m}mm$	622 （或 62）

Sch 符号	C_{6v}	C_{6h}	D_{3d}	C_{3h}	C_6	O_h	O	T_d	T_h	T
国际符号	$6mm$	$\frac{6}{m}$	$\bar{3}m$	$\bar{6}$	6	$m3m$	432 （或 32）	$\bar{4}3m$	$m3$	23

第三章　点群的不可约表示与 Clebsch-Gordan 系数

在这一章中将系统地讨论全部点群的不可约表示. 为了说明不可约表示基函数，首先讨论作用于函数空间中的群算子及其对函数空间的作用，并讨论由子群表示寻求群的表示的诱导表示方法. 而后详细研究第一类点群的不可约表示，在此基础上论述第二类点群的不可约表示，然后讨论双值点群和双值表示，并在讨论了不可约表示之后研究点群的 Clebsch-Gordan 系数和 V-系数，以 O 群为例给了全部 V-系数. 最后将讨论点群不可约张量算子和 Wigner-Eckart 定理.

3.1　函数空间上的算子群与群表示的基函数

点群 G 是三维实内积空间(即三维欧几里德空间) $\mathbf{R}^3$ 中的线性变换群，它的元素 $g \in G$ 作用于空间向量 $\boldsymbol{r}$ 上，把 $\boldsymbol{r}$ 变为另一个 $\boldsymbol{r}'$，即

$$g\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$$

因而 g 的表示矩阵为 3×3 的实矩阵 $D(g)$，即

$$\boldsymbol{r} = (x_1, x_2, x_3)\begin{pmatrix} \boldsymbol{i}_1 \\ \boldsymbol{i}_2 \\ \boldsymbol{i}_3 \end{pmatrix}$$

$$g\boldsymbol{r} = D(g)\boldsymbol{r} = (x_1, x_2, x_3)\begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{i}_1 \\ \boldsymbol{i}_2 \\ \boldsymbol{i}_3 \end{pmatrix}$$

$$D(g) = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix}$$

对于空间 $\mathbf{R}^3$ 定义的函数 $f(\boldsymbol{r})$，此时群元素 g 对函数的作用可定义为群算子 $\hat{P}(g)$ 对函数的作用，定义群算子 $\hat{P}(g)$ 对函数的作用为

$$\hat{P}(g)f(\boldsymbol{r}) = f'(\boldsymbol{r}) = f(g^{-1}\boldsymbol{r}) = f(\boldsymbol{r}') \tag{3.1.1}$$

$g \in G$ 与算子 $\hat{P}(g)$ 也是一种映射，$\{\hat{P}(g)\}$ 是作用于函数空间上的变换. 下面证明算子集合 $\{\hat{P}(g), g \in G\}$ 也是一个群，并且与群 G 同构.

算子 $\hat{P}(g_1)$ 与 $\hat{P}(g_2)$ 的乘法为

$$\hat{P}(g_1)\cdot\hat{P}(g_2)f(\boldsymbol{r}) = \hat{P}(g_1)f(g_2^{-1}\boldsymbol{r}) = f(g_2^{-1}\cdot g_1^{-1}\boldsymbol{r})$$

由于 $g_2^{-1}\cdot g_1^{-1}=(g_1\cdot g_2)^{-1}$，因而

$$\hat{P}(g_1)\cdot\hat{P}(g_2)f(\boldsymbol{r})=f((g_1\cdot g_2)^{-1}\boldsymbol{r})=\hat{P}(g_1\cdot g_2)f(\boldsymbol{r})$$

$$\hat{P}(g_1)\cdot\hat{P}(g_2)=\hat{P}(g_1\cdot g_2)$$

它也是作用于函数空间的算子，这表明算子乘法具有封闭性．显然算子乘法是符合结合律的．对应于群 G 中单位元 e 的算子 $\hat{P}(e)$ 为算子集合的单位元，即

$$\hat{P}(g)\cdot\hat{P}(e)f(\boldsymbol{r})=\hat{P}(g)f(\boldsymbol{r})=f(g^{-1}\boldsymbol{r})=\hat{P}(g)f(\boldsymbol{r})$$

$$\hat{P}(e)\cdot\hat{P}(g)f(\boldsymbol{r})=\hat{P}(g)f(\boldsymbol{r})$$

因为 $f(\boldsymbol{r})$ 是任意函数，因而 $\hat{P}(e)$ 为单位算子．$\hat{P}(g)$ 的逆 $\hat{P}(g)^{-1}=\hat{P}(g^{-1})$．因为

$$\begin{aligned}\hat{P}(g)\cdot\hat{P}(g)^{-1}f(\boldsymbol{r})&=\hat{P}(g)f(g\boldsymbol{r})=f(g^{-1}\cdot g\boldsymbol{r})=f(\boldsymbol{r})\\&=\hat{P}(g)^{-1}\cdot\hat{P}(g)f(\boldsymbol{r})=f(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

这就证明了算子集合 $\{\hat{P}(g_1),g\in G\}$ 是一个群，记为 $\hat{P}(G)$．下面证明算子群 $\hat{P}(G)$ 与 G 群同构．这一点很容易，即

$$P(G)\xrightarrow{\text{映射}}G$$

$$\hat{P}(g)\longrightarrow g\in G$$

这表明 $\hat{P}(g)$ 与 g 一一对应．若 $g_1\cdot g_2=g_3$，则

$$\hat{P}(g_1)\cdot\hat{P}(g_2)=\hat{P}(g_1\cdot g_2)=\hat{P}(g_3)$$

这表明相应元素的乘法也是相对应的，因而算子群 $\hat{P}(G)$ 与群 G 同构．群 G 是三维空间中的线性变换群，因而算子 $\hat{P}(g)$ 也是线性算子．

如果函数 $f(\boldsymbol{r})$ 与数域 C 上的数 c 的乘法为

$$cf(\boldsymbol{r})=f(c\boldsymbol{r})\tag{3.1.2}$$

称这种函数为线性函数，对线性函数定义内积为

$$(f_1,f_2)=\int_v f_1(\boldsymbol{r})^*f_2(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\tag{3.1.3}$$

这种定义有内积的线性函数空间通常称为 L_2 空间．作用于这种函数空间上定义的算子 $\hat{P}(g)$ 也是线性算子．

可以证明 $O(3)$ 群及其一切子群所定义的线性变换都是酉变换，因为内积

$$\begin{aligned}(\hat{P}(g)f_1,\hat{P}(g)f_2)&=\int_v(\hat{P}(g)f_1)^*\cdot\hat{P}(g)f_2\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\&=\int_v f_1(g^{-1}\boldsymbol{r})^*f_2(g^{-1}\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\&=\int_v f_1(\boldsymbol{r}')^*f_2(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\&=\int_v f_1(\boldsymbol{r}')^*f_2(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}(g^{-1}\boldsymbol{r}')\end{aligned}$$

而

$$d(g^{-1}\boldsymbol{r}') = |\det(g^{-1})| d\boldsymbol{r}'$$

对于 $O(3)$ 群及其子群

$$\det(g^{-1}) = \det g = \pm 1$$

因而

$$(f_1(\boldsymbol{r}), f_2(\boldsymbol{r})) = (\hat{P}(g)f_1(\boldsymbol{r}), \hat{P}(g)f_2(\boldsymbol{r})) \tag{3.1.4}$$

即 $\hat{P}(g)(g \in G, G \subset O(3))$ 为酉算子.

这里所讨论的作用于函数空间上的线性变换，实质上就是第一章所讨论的线性变换在函数空间上的具体化.

定义 3.1.1 群 G 的不变子空间：若 V_G 是 L_2 的子空间，V_G 中的每一个函数 $f(\boldsymbol{r})$，在群 $P(G)$ 中的任一元群 $\hat{P}(g)$ 作用下，仍为 V_G 中的一个函数，即

$$f(\boldsymbol{r}) \in V_G, \quad g \in G, \quad \hat{P}(g)f(\boldsymbol{r}) = f'(\boldsymbol{r}), \quad f'(\boldsymbol{r}) \in V_G$$

则称空间 V_G 是算子群 $P(G)$ 的不变空间，也就是群 G 的不变空间.

因而可把函数空间 L_2 分成若干群 G 的不变子空间 V_G.

不变子空间 V_G 荷载群 G 的一个表示，如果这个不变子空间内不再包括不变子空间，则这个表示是不可约表示，表示矩阵就是算子 $\hat{P}(g)$ 的矩阵. 为了说明这一点，令第 α 个不变子空间 $V_G^{(\alpha)}$ 为 n_α 维，它的一组基矢为 $(f_1^{(\alpha)}, f_2^{(\alpha)}, \cdots, f_{n_\alpha}^{(\alpha)})$. 亦即 $V_G^{(\alpha)}$ 中任一函数 $f^{(\alpha)} \in V_G^{(\alpha)}$，可表示为

$$f^{(\alpha)} = \sum_{i=1}^{l} a_i f_i^{(\alpha)}$$

于是

$$\hat{P}(g_i) f_j^{(\alpha)} = \sum_{k=1}^{n_\alpha} \alpha(g_i)_{kj} f_k^{(\alpha)} \tag{3.1.5}$$

其中系数 $\alpha(g_i)_{kj}$ 中的脚标 j 表示对 $f_j^{(\alpha)}$ 作用产生的函数. $\alpha(g_i)_{kj}$ 为算子 $\hat{P}(g_i)$ 的表示矩阵的矩阵元. 这个矩阵即为群元素 g_j 的表示矩阵，因而建立了群 G 的一个表示. 由于 V_G 中不再存在 G 的不变子空间，因而这个表示是不可约的.

用 $P_{kj}(g_j)$ 代替 $\alpha(g_j)_{kj}$，则第 α 个不可约表示的表示矩阵为

$$\hat{P}^{(\alpha)}(g_j) = \begin{pmatrix} P_{11}^{\alpha}(g_j) & P_{12}^{\alpha}(g_j) & \cdots & P_{1n_\alpha}^{\alpha}(g_j) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ P_{n_\alpha 1}^{\alpha}(g_j) & P_{n_\alpha 2}^{\alpha}(g_j) & \cdots & P_{n_\alpha n_\alpha}^{\alpha}(g_j) \end{pmatrix}$$

把第 α 个不可约表示的基矢 $\{f_i^{(\alpha)}\}$ 写为行矩阵 $(f_1^{(\alpha)}, f_2^{(\alpha)}, \cdots, f_{n_\alpha}^{(\alpha)})$. 则(3.1.5)式表示 $f_k^{(\alpha)}$ 在 $\hat{P}(g_j)$ 的作用下，按表示矩阵 $\hat{P}^{(\alpha)}(g_j)$ 的第 k 列变换，即

$$\hat{P}(g_j) f_k^{(\alpha)} = \sum_{l=1}^{n_\alpha} P^{(\alpha)}(g_j)_{lk} f_l^{(\alpha)} \tag{3.1.6}$$

下面给出不可约表示基矢的正交性定理.

定理 3.1.1 群 G 的两个不同不可约表示的基矢是相互正交的，同一个不可约表示的不同基矢也是相互正交的.

证明　令不可约表示空间 $V_G^{(\alpha)}$ 和 $V_G^{(\beta)}$ 的基矢分别为 $(f_1^{(\alpha)}, f_2^{(\alpha)}, \cdots, f_{n_\alpha}^{(\alpha)})$ 和 $(f_1^{(\beta)}, f_2^{(\beta)}, \cdots, f_{n_\beta}^{(\beta)})$，则利用(3.1.4)式和(3.1.6)式得到

$$\begin{aligned}(f_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)}) &= (\hat{P}(g)f_i^{(\alpha)}, \hat{P}(g)f_j^{(\beta)}) \\ &= (\sum_{k=1}^{n_\alpha} P_{ki}^{(\alpha)}(g)f_k^{(\alpha)}, \sum_{l=1}^{n_\beta} P_{lj}^{(\beta)}(g)f_l^{(\beta)}) \\ &= \sum_{k=1}^{n_\alpha}\sum_{l=1}^{n_\beta} P_{ki}^{(\alpha)*}(g)\cdot P_{lj}^{(\beta)}(g)(f_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)}) \end{aligned} \tag{3.1.7}$$

把上式对群元素 g 求和，得到

$$\begin{aligned}\sum_{g\in G}(f_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)}) &= n(f_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)}) \\ &= \sum_{g\in G}\sum_{k=1}^{n_\alpha}\sum_{l=1}^{n_\beta} P_{ki}^{(\alpha)}(g)^* P_{lj}^{(\beta)}(g)(f_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)})\end{aligned}$$

其中 n 为群 G 的阶，由不可约表示的广义正交定理得到

$$\sum_{g\in G} P_{ki}^{(\alpha)}(g)^* P_{lj}^{(\beta)}(g) = \delta_{\alpha\beta}\delta_{kl}\delta_{ij}\frac{n}{n_\alpha}$$

于是

$$(f_i^{(\alpha)}, f_j^{(\beta)}) = \frac{1}{n_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} \tag{3.1.8}$$

这就证明了上述定理.

由这个定理可得到下面的推论.

推论　不可约表示的 n_α 个基矢的内积为同一常数，即

$$(f_i^{(\alpha)}, f_i^{(\alpha)}) = \frac{1}{n_\alpha},\qquad i=1, 2, \cdots, n_\alpha \tag{3.1.9}$$

因此可把基矢归一化，得到正交归一化的基矢. 在正交归一化基矢中群的表示是酉表示.

3.2　基础表示与诱导表示

如果群 G 有一个子群 $H\subset G$，则 G 的表示矩阵 $D(g)(g\in G)$，收缩到子群 $H(h\in H)$ 得到矩阵集合 $\{D(h), h\in H\}$ 自然是子群 H 的表示，一般称这种表示为分导表示，并记为 $D(G)\downarrow_H$，即由 G 群的表示 $D(G)$ 收缩出的子群 H 的表示，即使 $D(g)$ 对群 G 是不可约表示，分导表示 $D(G)\downarrow_H$ 一般也是可约的.

如果已知子群 $H(H\subset G)$ 的表示 $D(h)(h\in H)$，把它扩展为群 G 的表示，称为由诱导得出的群 G 的表示(representation induced by subgroup)，简称诱导表示，记为 $D(H)\uparrow^G$. 从 H 群的不可约表示，得到的 G 群的诱导表示，一般也是可约的. 由于子群 H 比群 G 小，容易得到较小的子群 H 的表示，因而从子群的表示通过诱导表示的方法找出大群 G 的表示，是寻求群 G 的表示的常用的重要方法. 为此，在本节中讨论诱导表示.

若群 G 包括子群 H，则群 G 的元素也分解为子群 H 的若干个左陪集，如果子群是 m

阶的，群 G 是 n 阶的，则存在 $\frac{n}{m}=l$ 个互不相交的左陪集，即群 G 的元素集合 $\{g_1, g_2, \cdots, g_n\}$ 可表示为

$$\{g_1, g_2, \cdots, g_n\} = \{eH\} \oplus \{g_2H\} \oplus \cdots \oplus \{g_lH\} \tag{3.2.1}$$

其中 $g_1=e, g_2, \cdots, g_l \in G$，但除 $g_1=e$ 外，其它陪集代表元素 $g_2, g_3, \cdots, g_l$，不属于 H，它们为不同左陪集的代表元素.

假定子群 H 有 l_h 个不可约表示，不可约表示 α 的维数为 m_α，其基函数为

$$(e_1^{(\alpha)}, e_2^{(\alpha)}, \cdots, e_{m_\alpha}^{(\alpha)}), \quad \alpha = 1, 2, \cdots, l_h$$

这些基函数的变换性质为

$$\hat{P}(h)e_i^{(\alpha)} = \sum_j P_{ji}^{(\alpha)}(h)e_j^{(\alpha)}, \quad (h \in H) \tag{3.2.2}$$

$P^{(\alpha)}(h)$ 为子群 H 的第 α 个不可约表示的表示矩阵. 利用 $g_1, g_2, \cdots, g_l$（它们是 H 的左陪集的代表元素，$g_i \in G$, $g_i \notin H$）作用基函数 $(e_1^{(\alpha)}(\boldsymbol{r}), \cdots, e_{m_\alpha}^{(\alpha)}(\boldsymbol{r}))$ 得到

$$\hat{P}(g_i)e_j^{(\alpha)} = e_j^{(\alpha)}(g_i^{-1}\boldsymbol{r}) = e_{ji}^{(\alpha)}(\boldsymbol{r}), \quad i=2, 3, \cdots, l=\frac{n}{m} \tag{3.2.3}$$

这是 lm_α 个新的函数（包括 $e_1^{(\alpha)}, e_2^{(\alpha)}, \cdots, e_{m_\alpha}^{(\alpha)}$）. 下面证明这 lm_α 个函数构成一组基函数，它们张成 G 群的不变空间，因而荷载了群 G 的一个表示，亦即由子群 H 的不可约表示 α 诱导出的 G 群的诱导表示. 这个表示的维数为 lm_α.

为了证明上述命题，首先讨论基础表示.

3.2.1 基础表示

群 G 元素按子群 H 陪集分类（即(3.2.1)式），把陪集集合 $\{H\}, \{g_2H\}, \{g_3H\}, \cdots, \{g_lH\}$ 看成群空间的 l 个向量，以它们为基矢可以构成群 G 的一个表示，称这个表示为基础表示.

容易看到以群 G 的任一元素 g 作用第 i 个陪集，得到某一陪集 g_jH，即

$$g \cdot g_iH = g_jH, \quad g \cdot g_i = g_j$$

但是 $l=\frac{n}{m}$ 个陪集的代表元素 $g_1=e, g_2, g_3, \cdots, g_l$ 是已经指定的，因而陪集 g_jH 虽然一定是 l 个陪集中的一个，但 $g \cdot g_i = g_j$ 并不一定是已经指定的 l 个陪集代表元素之一. 一般来讲

$$g \cdot g_iH = g_jH = g_kH \qquad (g_k \text{ 为指定的陪集代表元素})$$

如果 g_j 是陪集代表元素，则 $g_j = g_k$；如果 g_j 不是陪集代表元素，则 g_j 一定是陪集 g_kH 中的一个元素，此时

$$g \cdot g_iH = g_kH$$

而且 $g \cdot g_i$ 为陪集代表元素 g_k 与 H 中某一元素 h_α 之积，即

$$g \cdot g_i = g_kh_\alpha \quad \text{或} \quad h_\alpha = g_k^{-1} \cdot g \cdot g_i \tag{3.2.4}$$

(3.2.4)式说明群 G 中任意元素 g 与陪集代表元素 g_i 之积为陪集 g_kH 中的元素 g_kh_α（即 $g \cdot g_iH = g_kH$），h_α 完全由 g, g_i 决定. 因而可把(3.2.4)式中的 h_α 写为 g_i 和 g 的函数，

即

$$h_\alpha = h(g, g_i) \equiv h_i^k(g) = g_k^{-1} \cdot g \cdot g_i \in H \tag{3.2.5}$$

$h_i^k(g)$为由陪集代表元素 g_i, g_k 按(3.2.4)决定的子群 H 中的元素 h_α. 这个公式表明，群 G 中任意元素 g 与陪集代表元素 g_i 之积得到陪集 g_kH 中的元素 $g_k \cdot h_i^k(g)$. 因而

$$g \cdot g_iH = g_kH$$

中的代表元素 g_k 由 $g_k \cdot h_i^k(g) = g \cdot g_i$ 决定. 而按基础表示的定义，

$$g \cdot (g_iH) = \sum_k G_h^d(g)_{ki} \cdot (g_kH) \tag{3.2.6}$$

因而基础表示的表示矩阵为

$$G_h^d(g)_{ki} = \begin{cases} 1, & \text{当 } k \text{ 满足条件 } g \cdot g_i = g_k \cdot h_i^k(g) \\ 0, & \text{当 } k \text{ 不满足条件 } g \cdot g_i = g_k \cdot h_i^k(g) \end{cases} \tag{3.2.7}$$

$G^d(g)$中的 d 代表基础表示.

基础表示与第一章中讨论的正则表示相类似，只是正则表示是以群元素为基矢的群空间中给出的表示，它是 n 维表示. 而基础表示是以陪集为基矢的表示，它的维数为 $l = n/m$, l 为子群的陪集的数目，n 为群 G 的阶，m 为子群 H 的阶.

下面以 D_n 群为例，求出它的基础表示.

D_n 群阶为 $2n$，包括 n 阶子群 $C_n = \{C_n^k, k = 1, 2, \cdots, n\}$ 和陪集 $C_2^{(1)}\{C_n\} = \{C_2^{(k)}, k = 1, 2, \cdots, n\}$. 把它们写为

$$H_1 = E\{C_n\} = \{C_n^k, k = 1, 2, \cdots, n\}$$
$$H_2 = C_2^{(1)}\{C_n\} = \{C_2^{(k)}, k = 1, 2, \cdots, n\}$$

陪集代表元素 $g_1 = E$, $g_2 = C_2^{(1)}$.

容易看到 D_n 中元素 g 作用于两个陪集为

$$gH_1 = \begin{cases} H_1, & \text{当 } g \in H_1 \\ H_2, & \text{当 } g \in H_2 \end{cases}$$

$$gH_2 = \begin{cases} H_2, & \text{当 } g \in H_1 \\ H_1, & \text{当 } g \in H_2 \end{cases}$$

由此得到基础表示矩阵为

$$G_{D_n}^d(C_n^k) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad G_{D_n}^d(C_2^{(k)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

因为这个群的陪集简单，通过上面直接计算很容易得到了基础表示. 下面利用(3.2.5)式和(3.2.7)式计算基础表示.

对于 D_n 群两个陪集代表元素为 $g_1 = E$, $g_2 = C_2^{(1)}$. 当(3.2.7)中 $i = 1$ 时，

$$G_{C_n}^{(d)}(C_n^k)_{11} = \begin{cases} 1, & C_n^kE = C_n^k = E\{C_n\} \\ 0, & C_n^kE \neq C_2^{(1)}\{C_n^{(k)}\} \end{cases}$$

$$G_{C_n}^d(C_2^{(k)})_{21} = \begin{cases} 1, & C_2^{(k)}E = C_2^{(k)} = C_2^{(k)}E \\ 0, & C_2^{(k)}E \neq E\{C_{2n}^k\} \end{cases}$$

当 $i = 2$ 时，

$$G_{C_n}^{(d)}(C_n^k)_{21}=\begin{cases}1, & C_n^kC_2^{(1)}=C_2^{(k)}=C_2^{(1)}\{C_n\}\\0, & C_n^kE=C_n^k\neq C_2^{(1)}\{C_n\}\end{cases}$$

$$G_{C_n}^{(d)}(C_2^{(k)})_{32}=\begin{cases}1, & C_2^{(k)}C_2^{(1)}\neq C_2^{(1)}\{C_n\}\\0, & C_2^{(k)}C_2^{(1)}=C_2^{(1)}\{C_n\}\end{cases}$$

因而得到

$$G_{C_n}^{(d)}(C_n^k)=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix},\quad G_{C_n}^{(d)}(C_2^k)=\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$$

3.2.2 诱导表示

群 G 的子群 H 的一个不可约表示(γ)的基函数$\{e_1^{(\gamma)}(\boldsymbol{r}), e_2^{(\gamma)}(\boldsymbol{r}), \cdots, e_{m_\gamma}^{(\gamma)}(\boldsymbol{r})\}$，省略标志不可约表示的标记$\gamma$，用$\alpha=1, 2, \cdots, m_\gamma$ 标记基矢的编号，则为$\{e_\alpha(\boldsymbol{r}), \alpha=1, 2, \cdots, m_\gamma\}$，陪集代表元素 $g_i(i=2, 3, \cdots, l=\frac{n}{m})$作用后得到 lm_γ 个函数，即

$$\hat{P}(g_i)e_\alpha(\boldsymbol{r})=e_\alpha(g_i^{-1}\boldsymbol{r})=e_{\alpha i}(\boldsymbol{r}) \tag{3.2.8}$$

$(\alpha=1, 2, \cdots, m_\gamma, i=1, 2, \cdots, l=\frac{n}{m})$，$g_i=g_1=E$ 时，$e_{\alpha i}(\boldsymbol{r})=e_i(\boldsymbol{r})$. 用群 G 的算子 $\hat{P}(g)$作用(3.2.8)式，得到

$$\hat{P}(g)e_{\alpha i}(\boldsymbol{r})=\hat{P}(g)\cdot\hat{P}(g_i)e_\alpha(\boldsymbol{r})=\hat{P}(g\cdot g_i)e_\alpha(\boldsymbol{r}) \tag{3.2.9}$$

g_i 是陪集代表元素，因而当 $g\cdot g_i$ 是陪集 g_kH 中的元素时，与(3.2.5)式一样，则为

$$g\cdot g_i=g_k\cdot h_j^k(g)$$

即 $g\cdot g_i$ 属于陪集 g_kH，具体为 $g_k\cdot h_j(g)$. 子群 H 中的具体元素 h_j 由 g 和 g_k 决定，因而为 g 和 g_k 的函数即 $h_j^k(g)$. 利用这种关系可把(3.2.9)式写为

$$\begin{aligned}\hat{P}(g)e_{\alpha i}(\boldsymbol{r})&=\hat{P}(g)\cdot\hat{P}(g_i)e_\alpha(\boldsymbol{r})=\hat{P}(g\cdot g_i)e_\alpha(\boldsymbol{r})\\&=\hat{P}(g_k\cdot h_j^k(g))e_\alpha(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

根据基础表示的定义

$$g\cdot g_i=\sum_j G_h^{(d)}(g)_{ji}\cdot g_j\cdot h_i^k(g)$$

$$\hat{P}(g\cdot g_i)=\sum_j G_h^{(d)}(g)_{ji}\cdot\hat{P}(g_j)\cdot\hat{P}(h_i^k(g))$$

因而上式为

$$\hat{P}(g)e_{\alpha i}(\boldsymbol{r})=\sum_j G_h^{(d)}(g)_{ji}\cdot\hat{P}(g_j)\cdot\hat{P}(h_i^k(g))e_\alpha(\boldsymbol{r}) \tag{3.2.10}$$

因为$\{e_\alpha(\boldsymbol{r})\}$是子群 H 的不可约表示 γ 的基矢，因而

$$\hat{P}(h_i^k(g))e_\alpha(\boldsymbol{r})=\sum_{\beta=1}^{m}H^\gamma(h_i^k(g))_{\beta\alpha}e_\beta(\boldsymbol{r}) \tag{3.2.11}$$

由(3.2.10)式，

$$\hat{P}(g)e_{\alpha i}(\boldsymbol{r})=\sum_{j=1}^{l}\sum_{\beta=1}^{m}H^\gamma(h_i^k(g))_{\beta\alpha}\cdot G_h^{(d)}(g)_{ji}\cdot\hat{P}(g_j)e_\alpha(\boldsymbol{r})$$

$$= \sum_{j=1}^{l} \sum_{\beta=1}^{m} H'(h_i^k(g))_{\beta\alpha} \cdot G_h^{(d)}(g)_{ji} e_{\alpha_j}(r) \tag{3.2.12}$$

(3.2.12)式说明，由 G 群的子群 H 不可约表示基函数$(e_1^{(\alpha)}, e_2^{(\alpha)}, \cdots, e_{m_\alpha}^{(\alpha)})$，通过陪集代表元素$\{g_1, g_2, g_3, \cdots, g_l\}$产生 lm_α 个函数$\{\hat{P}(g_i)e_\beta^{(\alpha)}(r) = e_\beta^{(\alpha)}(g_i^{-1}r) = e_{\beta i}^{(\alpha)}(r), i=1, 2, \cdots, l, \beta=1, 2, \cdots, m_\alpha\}$，以它们为基函数构成 G 群的表示空间，在这个空间上建立的 G 群的表示，称为由子群 H 的 m_α 维不可约表示诱导出的群 G 的诱导表示，表示矩阵为

$$G_G(g)_{k\beta, i\alpha} = G_h^{(d)}(g)_{ki} \cdot H(h_i^k(g))_{\beta\alpha} \tag{3.2.13}$$

$k, i=1, 2, \cdots, l=\dfrac{n}{m}$; $\alpha, \beta=1, 2, \cdots, m_\alpha$，因而由 4 个脚标构成的表示矩阵是 lm_α 维的. H 中的 h_α 由下式决定:

$$g \cdot g_i = g_k \cdot h_\alpha = h_i^k(g) \tag{3.2.14}$$

3.2.3　诱导表示的有关定理

为了利用诱导表示的方法，由子群的表示寻求群的表示，下面两个定理是很有用的.

定理 3.2.1(等价定理)　设 $D(G)$ 和 $D(H)$ 分别为群 G 和 H 的表示，H 为 G 的子群 $(H \subset G)$，则直积表示

$$D(G) \otimes \{D(H)\uparrow^G\} \text{与} \{D(G)\downarrow_H \otimes D(H)\}\uparrow^G$$

是等价表示.

证明　等价表示的充要条件是它们的特征标有相等的分量. 这个定理的证明归之于计算它们的特征标. 为了标记某个表示的特征标，把特征标的分量记为$\chi(g|D(G))$，即 G 群表示 $D(G)$ 对群元素 g 的特征标分量. 特征标记为$\chi(D(G))$，因而直积表示 $D(G) \otimes \{D(H)\uparrow^G\}$ 的特征标分量为

$$\chi(g|D(G) \otimes \{D(H)\uparrow^G\}) = \chi(g|D(G)) \cdot \chi(g|D(H)\uparrow^G)$$

由(3.2.13)式得到

$$\chi(g \mid D(H)\uparrow^G) = \sum_{i\beta} G_h^{(d)}(g)_{ii} H(h_i^k(g))_{\beta\beta}$$

利用(3.2.5)式得到

$$\begin{aligned}\chi(g \mid D(H)\uparrow^G) &= \sum_{i\beta} G_h^d(g)_{ii} \cdot H(h_i^k(g))_{\beta\beta} \\ &= \sum_i G_h^d(g)_{ii} \cdot \chi(g_k^{-1} \cdot g \cdot g_i \mid H)\end{aligned}$$

由基础表示矩阵(3.2.7)式，得到上式为

$$\chi(g \mid D(H)\uparrow^G) = \sum_i \chi(g_k^{-1} \cdot g \cdot g_i \mid H), \quad g_k^{-1} \cdot g \cdot g_i \in H \tag{3.2.15}$$

因而

$$\begin{aligned}&\chi(g \mid D(G) \otimes \{D(H)\uparrow^G\}) \\ &= \chi(g \mid D(G) \sum_i \chi(g_k^{-1} \cdot g \cdot g_i \mid H)\end{aligned} \tag{3.2.16}$$

在(3.2.16)式中通过对 i 的求和，因为 k 也是 i 的函数，最后为一个与 g 有关的数，另一方面，直积表示 $\{D(G)\downarrow_H\}\otimes\{D(H)\}\uparrow^G$ 的特征标由(3.2.15)式得到

$$\chi(g \mid \{D(G)\downarrow_H \otimes D(H)\}\uparrow^G)$$
$$= \sum_\alpha \chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid (D(G)\downarrow_H \otimes D(H))$$

直积表示 $D(G)\downarrow_H \otimes D(H)$ 的特征标为两个直积表示的特征标之积，即

$$\chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid D(G)\downarrow_H \otimes D(H))$$
$$=\chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid D(G)\downarrow_H)\cdot\chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid H)$$

因而

$$\chi(g \mid \{D(G)\downarrow_H \otimes D(H)\uparrow^G\})$$
$$= \sum_\alpha \chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid D(G)\downarrow_H)\cdot\chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid H)$$

而分导表示 $D(G)\downarrow_H$ 的特征标就是 G 群表示 D 只取子群 H 中的元素而得到的特征标，故此特征标分量为

$$\chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid D(G)\downarrow_H)=\chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid D(G))$$

由此得到

$$\chi(g)(\{D(G)\downarrow_H \otimes D(H)\uparrow^G\})$$
$$= \sum_\alpha \chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha)\mid D(G)\cdot\chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid H)$$

而

$$\chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid D(G)) = \mathrm{Tr}D(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha)$$
$$=\mathrm{Tr}[D(g_\alpha^{-1})D(g)D(g_\alpha)] = \mathrm{Tr}D(g)$$
$$=\chi(g \mid D(G))$$

最后得到

$$\chi(g \mid \{D(G)\downarrow_H \otimes D(H)\uparrow^G\})$$
$$=(\chi(g)\mid D(G))\cdot \sum_\alpha \chi(g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha \mid H) \tag{3.2.17}$$

从而证明了 $D(G)\otimes\{D(H)\uparrow^G\}$ 与 $\{D(G)\downarrow_H \otimes D(H)\uparrow^G\}$ 的特征标相同，因而它们是等价表示. 此即(3.2.17)式，从而证明了本定理.

定理 3.2.2(互易定理或 Frobenins 定理) 若 H 是 G 的子群($H\subset G$)，$D(G)$，$D(H)$ 分别为群 G 和子群 H 的不可约表示. 则 $D(G)\downarrow_H$ 和 $D(H)\uparrow^G$ 一般都是可约的，$D(G)$ 在 $D(H)\uparrow^G$ 中出现的重复度与 $D(H)$ 在 $D(G)\downarrow_H$ 中出现的重复度相等.

证明 由第一章关于特征标理论的(1.12.16)式知道，不可约表示 $D(H)$ 在 $D(G)\downarrow_H$ 中出现的重复度等于它们的特征标的内积，即

$$(\chi(D(H)),\chi(D(G)\downarrow_H)) = \frac{1}{m}\sum_{h\in H}\chi^*(h \mid D(H)\cdot\chi(h \mid D(G)\downarrow_H) \tag{3.2.18}$$

另一方面，$D(H)\uparrow^G$ 在 $D(G)$ 中出现的重复度为

$$(\chi(D(G)),\chi(D(H)\uparrow^G)) = \frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^*(g \mid D(G))\chi(g \mid D(H)\uparrow^G)$$

利用(3.2.15)式得到

$$
\begin{aligned}
&(\chi(D(G)),\chi(D(H)_{\uparrow}^{G}))\\
&=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{*}(g\mid D(G))\sum_{\beta}\chi(g_{\beta}^{-1}\cdot g\cdot g_{\beta}\mid D(H))
\end{aligned}
\tag{3.2.19}
$$

g_β 为陪集代表元素，共有$\frac{n}{m}$个，其中

$$
\chi(g_{\beta}^{-1}\cdot g\cdot g_{\beta}\mid D(H))=\begin{cases}0, & \text{当 } g_{\beta}^{-1}\cdot g\cdot g_{\beta}\text{ 不属于 } H\\ \chi(g_{\beta}^{-1}\cdot g\cdot g_{\beta}\mid D(H)), & \text{当 } g_{\beta}^{-1}\cdot g\cdot g_{\beta}\in H\end{cases}
$$

因而(3.2.18)式中的对 $g\in G$ 求和可换为对 $h\in H$ 求和，即

$$
\begin{aligned}
&(\chi(D(G))\quad,\quad\chi(D(H)_{\uparrow}^{G}))\\
&=\frac{1}{n}\sum_{h\in H}\chi^{*}(h\mid D(G))\sum_{\beta}\chi(g_{\beta}^{-1}\cdot g\cdot g_{\beta}\mid D(H))\\
&=\frac{1}{n}\sum_{h\in H}\chi^{*}(h\mid D(G)_{H}^{\downarrow})\sum_{\beta}\chi(g_{\beta}^{-1}\cdot h\cdot g_{\beta}\mid D(H))\\
&=\frac{1}{m}\sum_{h\in H}\chi^{*}(h\mid D(G)_{H}^{\downarrow})\chi(h\mid D(H))\\
&=(\chi(D(G)_{H}^{\downarrow}),\chi(D(H)))
\end{aligned}
\tag{3.2.20}
$$

(3.2.20)式是(3.2.19)式的复数共轭，因为重复度为实数，所以它们相等，这就证明了此定理. 在上式中利用了

$$
\sum_{\beta}\chi(g_{\beta}^{-1}\cdot h\cdot g_{\beta}\mid D(H))=\frac{n}{m}\chi(h\mid D(H))
$$

因为 $g_{\beta}^{-1}\cdot h\cdot g_{\beta}$ 当 β 变化时，给出 h 的共轭元素，特征标是类的函数，因而对 β 求和等于 $\chi(h|D(H))$ 乘以 β 变化的数目，而 g_β 是陪集的代表元素，一共有 n/m 个，m 为子群 H 的维数，这是(3.2.20)式由第三步得到第四步的原因.

3.2.4　诱导表示的举例

以 D_3 群为例，它的不变子群为 C_3，D_3 群的元素可表示为 $C_3=\{C_3,\ C_3^2,\ C_3^3=E\}$ 和陪集 $C_2^{(1)}\cdot C_3=\{C_2^{(1)},\ C_2^{(2)},\ C_2^{(3)}\}$，以它们为基矢，即 $e_1=\{C_3\}=\{C_3,\ C_3^2,\ C_3^3\}$，$e_2=C_2^{(1)}\cdot\{C_3\}=\{C_2^{(1)},\ C_2^{(2)},\ C_2^{(3)}\}$ 的基础表示为 $G^{(d)}(g)$，则

$$
g\cdot e_i=\sum_{j}D_{ji}^{(d)}(g)e_j
$$

由乘法表得到

$$
C_3^{(k)}e_i=e_i,\quad k=1,2,3,\quad i=1,2
$$

$$
C_2^{(k)}e_i=\begin{cases}e_1, & \text{若 } i=2\\ e_2, & \text{若 } i=1\end{cases}\quad(k=1,2,3)
$$

由此得到基础表示为

$$
G^{(d)}(g)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad g=C_3^k,\quad k=1,2,3
$$

$$G^{(d)}(g)=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad g=C_2^k,\quad k=1,2,3$$

由(3.2.13)式诱导表示为

$$G_{C_3}^{D_3}(g)_{k\beta,i\alpha}=G_{C_3}^{(d)}(g)_{ki}\cdot D_{C_3}(h_i(g))_{\beta\alpha}$$

其中

$$h_i(g)=g_k^{-1}\cdot g\cdot g_i$$

C_3 群是 Abel 群，它的所有表示都是一维的，取为

$$D_{C_3}(C_3)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi/3}=\varepsilon,\quad D_{C_3}(C_3^2)=\varepsilon^2,\quad D_{C_3}(C_3^3)=1$$

由此得到

$$G_{C_3}^{D}(g)_{k,i}=G_{D_3}^{(d)}(g)_{k,i}\cdot\chi^{(C_3)}(g_k^{-1}\cdot g\cdot g_i)\tag{3.2.21}$$

其中$\chi^{(C_3)}(g_k^{-1}\cdot g\cdot g_i)$为 C_3 群的表示，因为是一维的，也就是它的特征标.

当 $k=i=1$ 时，$E\cdot g\cdot E\in C_3$，g 只能为 C_3，C_3^2，C_3^3，因而

$$G_{C_3}^{D_3}(E)_{11}=1,\quad G_{C_3}^{D_3}(C_3)_{11}=\varepsilon,\quad G_{C_3}^{D}(C_3^2)_{11}=\varepsilon^2$$

当 $k=i=2$ 时，$C_2^{(1)}\cdot g\cdot C_2^{(1)}\in C_3$，$g$ 也只能为 C_3，C_3^2，C_3^3，因而

$$G_{C_3}^{D_3}(E)_{22}=1,\quad G_{C_3}^{D_3}(C_3)_{22}=\varepsilon^2,\quad G_{C_3}^{D_3}(C_3^2)_{22}=\varepsilon$$

当 $k=1$，$i=2$ 时，$E\cdot g\cdot C_2^{(1)}=g\cdot C_2^{(1)}\in C_3$，$g=C_2^{(1)}$，$C_2^{(2)}$，$C_2^{(3)}$；

当 $k=2$，$i=1$ 时，$C_2^{(1)}\cdot g\cdot E=C_2^{(1)}\cdot g\in C_3$，$g=C_2^{(1)}$，$C_2^{(2)}$，$C_2^{(3)}$.

于是得到

$$G_{C_3}^{D_3}(C_2^{(1)})_{1,2}=1,\qquad G_{C_3}^{D_3}(C_2^{(1)})_{2,1}=1$$
$$G_{C_3}^{D_3}(C_2^{(2)})_{1,2}=\varepsilon^2,\qquad G_{C_3}^{D_3}(C_2^{(2)})_{2,1}=\varepsilon$$
$$G_{C_3}^{D_3}(C_2^{(3)})_{1,2}=\varepsilon,\qquad G_{C_3}^{D_3}(C_2^{(3)})_{2,1}=\varepsilon^2,$$

最后得到诱导表示

$$G_{C_3}^{D_3}(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad G_{C_3}^{D_3}(C_3)=\begin{pmatrix}\varepsilon&0\\0&\varepsilon^2\end{pmatrix},\quad G_{C_3}^{D_3}(C_3^2)=\begin{pmatrix}\varepsilon^2&0\\0&\varepsilon\end{pmatrix}$$

$$G_{C_3}^{D_3}(C_2^{(1)})=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad G_{C_3}^{D_3}(C_2^{(2)})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon^2\\\varepsilon&0\end{pmatrix},\quad G_{C_3}^{D_3}(C_2^{(3)})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon\\\varepsilon^2&0\end{pmatrix}$$

这是一个酉表示.

3.3 C_n 群和 D_n 群的不可约表示

群的表示由群的结构所决定. 两个相互同构的有限群有相同的表示. 因而对于点群只须研究互不同构那些点群的不等价不可约表示问题. 点群中有很多群可表示为两个点群的直积，而直积群的不可约表示可由直积因子群的不可约表示的直积构成. 因此点群的不可约表示问题归结为第一类点群的不可约表示问题. 它们可分为五类：

(1) Abel 群，包括 C_m，$m=1,2,3,\cdots$和 D_2.

(2) D_n 群，$n\geqslant2$：当 $n=2m$ 时有 $3+m$ 个类，因而有 $3+m$ 个不等价的不可约表示；

当 $n=2m+1$ 时，它有 $m+2$ 个类，有 $m+2$ 个不等价的不可约表示.

(3) T 群，有 4 个类，因而有 4 个不等价的不可约表示.

(4) O 群，有 5 个不等价的不可约表示.

(5) I 群，有 5 个不等价的不可约表示.

根据第一章给出的有限群不等价的不可约表示的数目为群的类的数目的定理和全部不可约表示的维数平方之和等于群的阶数的定理 $\sum_{\gamma=1}^{l} m_\gamma^2 = n$，可由不等价不可约表示的数目 l(即群的类的数目)和群的阶数 n 唯一地确定出所有不可约表示(以 γ 标记)的维数 m_γ.

所有点群，除 I 群有一个五维不可约表示外，其它群的不可约表示的维数不超过三维. 因而，通常用三维空间(x, y, z)和二次齐次函数空间作为点群的不可约表示空间，二次齐次函数空间为六维函数空间，它的基矢是$\{x^2, y^2, z^2, xy, yz, xz\}$. 注意这组基矢并非正交归一化的，因而在此基础上得到的表示不是酉表示.

所有的点群都存在一个一维的恒等表示，一般记为 A_1，一维表示的表示矩阵为 1，这个表示是所有群元素都映射到 1 的同态，即

$$\text{点群 } G \xrightarrow{\text{同态}} 1$$

$$g \in G \longrightarrow 1$$

荷载这个表示的基函数为

$$f(\boldsymbol{r}) = (\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = x^2 + y^2 + z^2$$

下面证明这个定理

定理 3.3.1　$O(3)$群及其子群都有一个一维的恒等表示，表示矩阵均为 1，荷载这个表示的基函数是 $f(\boldsymbol{r}) = (\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = r^2$.

证明　$O(3)$群及其子群的一切群元素都可表示为正交矩阵，即实的酉矩阵，因而任一群元素 $R \in O(3)$，在函数空间的算子 $\hat{P}(R)$均为实酉算子. 于是它作用于函数 $f(\boldsymbol{r}) = (\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = (x^2+y^2+z^2)$为

$$\hat{P}(R)f(\boldsymbol{r}) = (R^{-1}\boldsymbol{r}, R^{-1}\boldsymbol{r})$$

因为 R 是实酉变换，则

$$(R^{-1}\boldsymbol{r}, R^{-1}\boldsymbol{r}) = (\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = f(\boldsymbol{r})$$

这就证明了上述定理.

标记点群的不可约表示的符号有一个通用的惯例，即用 A 标记恒等表示，B 标记其它一维表示，在第一类点群中当存在 m 重轴时，B 所标记的一维表示通常对 C_m 轴是反对称的，即 $\chi(C_m) = -1$. 用 E 标记二维表示，T 标记三维表示. 如出现两个以上相同维数的表示时，在 A、B、E 或 T 加下脚标或在它们上边打撇，如存在垂直于主轴 C_m 的二重轴，则加下脚标，加脚标 1，表示对 C_2 轴是对称的，加 2 则表示对 C_2 是反对称的. 如存在反射面 σ_h 则在 A、B 等符号上打撇，打一撇(如 A'、B')则表示对反射面 σ_h 是对称的，打二撇(如 A''、B'')则表示对 σ_h 是反对称的. 对由直积群 $G \otimes I$ 构成的第二类点群，须在 A、B、E、T 等加下脚标 g 或 u. 加 g 表示对反演 I 是对称的，如 A_g、B_g、E_g、T_g 等. 加 u

表示对反演是反对称的，如 A_u、B_u 等. 对 I 群的四维表示用 G 代表，五维表示用 H 代表，相应的 I_h 群存在表示 G_g、G_u、H_g、H_u.

3.3.1 Abel 点群 $\mathscr{C}_n$ 和 D_2 的不可约表示及其基矢

1. $\mathscr{C}_n$ 群的不可约表示及其基矢

$\mathscr{C}_n$ 群是 n 阶循环群，即

$$C_n^m \cdot C_n^l = C_n^{m+l}, \ C_n^n = E$$

它有 n 个元素，每一个元素自成一类，共 n 类，因而有 n 个不等价的不可约表示. 由(1.11.14)式，不可约表示维数平方之和等于群的阶，即

$$\sum_{\alpha=1}^{n} m_\alpha^2 = n$$

得到 $\mathscr{C}_n$ 群有 n 个不等价的不可约表示，它为$\chi^p(C_m^k)$，$p=1, 2\cdots n$. 由特征标第二正交关系(1.11.15′)得到

$$\sum_p \chi^{(p)}(C_n^i)^* \cdot \chi^{(p)}(C_n^j) = \delta_{ij} n \tag{3.3.1}$$

方程(3.3.1)的解为

$$\chi^{(p)}(C_n^j) = e^{i\left(\frac{2\pi jp}{n}\right)} = \varepsilon^{jp}, \qquad \varepsilon = e^{i\frac{2\pi}{n}} \tag{3.3.2}$$

显然第 n 个不可约表示为恒等表示，即 $p=n$，从而

$$\chi^{(n)}(C_n^j) = e^{i\frac{2\pi jp}{n}} = e^{i(2\pi j)} = 1 \tag{3.3.3}$$

记为不可约表示 A.

若 n 为偶数，$n=2m$，则第 m 个不可约表示为

$$\chi^{(m)}(C_n^j) = e^{i\frac{2\pi mj}{2m}} = e^{i\pi j} = \begin{cases} 1, & \text{当} j \text{为偶数} \\ -1, & \text{当} j \text{为奇数} \end{cases} \tag{3.3.4}$$

这个表示记为 B，显然 B 对于 $C_n^m = C_2$ 是反对称的. 容易看到，n 个不可约表示是相互正交的，即

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{k=1}^{n} \chi^{(p)}(C_n^k)^* \cdot \chi^{(q)}(C_n^k) = \sum_{k=1}^{n} e^{-i\frac{2\pi}{n}p\cdot k} \cdot e^{i\frac{2\pi}{n}q\cdot k} = \sum_{k=1}^{n} e^{i\frac{2\pi}{n}k(q-p)} = n\delta_{p,q} \\ \displaystyle\sum_{p=1}^{n} \chi^{(p)}(C_n^k)^* \cdot \chi^{(p)}(C_n^{k'}) = \sum_{p=1}^{n} e^{i\frac{2\pi}{n}p(k'-k)} = n\delta_{k,k'} \end{cases} \tag{3.3.5}$$

$\mathscr{C}_n$ 群的这些不可约表示是复表示，下面分别对 $n=2m+1$ 和$n=2m$给出了特征标表，因为表示是一维的，所以特征标也就是表示矩阵.

$\mathscr{C}_{2m}$	E	C_{2m}	C_{2m}^2	C_{2m}^3	C_{2m}^4	C_{2m}^5	…	C_{2m}^{2m-1}
A	1	1	1	1	1	1	…	1
B	1	−1	1	−1	1	−1	…	−1
(P)	1	ε_{2m}^{p}	ε_{2m}^{2p}	ε_{2m}^{3p}	ε_{2m}^{4p}	ε_{2m}^{5p}	…	$\varepsilon_{2m}^{p(2m-1)}$
$(q)=2m-p$	1	ε_{2m}^{*p}	ε_{2m}^{*2p}	ε_{2m}^{*3p}	ε_{2m}^{*4p}	ε_{2m}^{*5p}	…	$\varepsilon_{2m}^{*p(2m-1)}$

$p=1, 2, , \cdots, , m-1, \quad q=m+1, m+2, \cdots, 2m-1, \quad \varepsilon_{2m}^{kp} = e^{i\frac{2\pi kp}{2m}}$

$\mathscr{C}_{2m+1}$	E	C_{2m+1}	C_{2m+1}^2	C_{2m+1}^3	C_{2m+1}^4	C_{2m+1}^5	…	C_{2m+1}^{2m}
A	1	1	1	1	1	1	…	1
(P)	1	ε_{2m+1}^{p}	ε_{2m+1}^{2p}	ε_{2m+1}^{3p}	ε_{2m+1}^{4p}	ε_{2m+1}^{5p}	…	ε_{2m+1}^{2mp}
$q=2m+1-p$	1	ε_{2m+1}^{*p}	ε_{2m+1}^{*2p}	ε_{2m+1}^{*3p}	ε_{2m+1}^{*4p}	ε_{2m+1}^{*5p}	…	$\varepsilon_{2m+1}^{*2mp}$

$p=1, 2, \cdots, m,\quad q=m+1, m+2, \cdots, 2m,\quad \varepsilon_{2m+1}^{kp}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{2\pi kp}{2m+1}}$

由于不可约表示(p)与$(q)(q=2m+1-p)$的特征标为ε^{kp}和$\varepsilon^{kq}=\varepsilon^{*kp}$，它们互为共轭表示. 因而有的书把不可约表示$(p)$与$(q=n-p)$的直和写为一个二维表示，即

$$E_p=(p)\oplus(q),\quad \chi^{(E_p)}(C_n^k)=\varepsilon^{kp}+\varepsilon^{*kp}=2\cos\left(\frac{2\pi}{n}pk\right)$$

由于$\varepsilon_n^{k_p}(k)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{2\pi}{n}kp}$，显然$\varepsilon_n^{(n-p)k}(k)=\varepsilon_n^{pk*}(k)^*$，这说明第$k$个不可约表示与第$(n-k)$个不可约表示互为复数共轭. 因而对于$n=2m$的$C_{2m}$群除去不可约表示$A$和$B$之外，尚有$2(m-1)$个不可约表示，它们构成$(m-1)$对互为复数共轭的表示，即不可约表示$(p)$与$(2m-p)$互为共轭表示.

对$n=2m+1$的$\mathscr{C}_{2m+1}$群除去不可约表示A外，还有m对互为复共轭的不可约表示. 通常把它们看成是由二维可约表示分解而得到的，因而可用二维表示E来标记它们.

下面讨论$\mathscr{C}_n$群不可约表示的基函数和表示空间.

1° 三维空间(x, y, z)中$\mathscr{C}_n$群的表示

首先在三维空间(x, y, z)中建立$\mathscr{C}_n$群的表示. 在(x, y, z)空间中$\mathscr{C}_n$群的旋转轴取为z轴，群元素为

$$C_n^k=\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi k}{n} & -\sin\frac{2\pi k}{n} & 0\\ \sin\frac{2\pi k}{n} & \cos\frac{2\pi k}{n} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

可见它是一个可约表示，可约化为

$$C_n^k=\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi k}{n} & -\sin\frac{2\pi k}{n}\\ \sin\frac{2\pi k}{n} & \cos\frac{2\pi k}{n}\end{pmatrix}\oplus\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

并记$\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$为[1]，[1]是一维表示. 显然荷载这个一维表示的是子空间$\{z\}$，z是在C_n^k作用下不变的，因而荷载了恒等表示.

另外的二维表示

$$\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi k}{n} & -\sin\frac{2\pi k}{n}\\ \sin\frac{2\pi k}{n} & \cos\frac{2\pi k}{n}\end{pmatrix}$$

是可约的，利用酉矩阵

$$U=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & \mathrm{i}\\ -\mathrm{i} & -1\end{pmatrix} \tag{3.3.6}$$

可把它约化为对角形式：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & \mathrm{i}\\ -\mathrm{i} & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi k}{n} & -\sin\frac{2\pi k}{n}\\ \sin\frac{2\pi k}{n} & \cos\frac{2\pi k}{n}\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & \mathrm{i}\\ -\mathrm{i} & -1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi k}{n}+\mathrm{i}\sin\frac{2\pi k}{n} & 0\\ 0 & \cos\frac{2\pi k}{n}-\mathrm{i}\sin\frac{2\pi k}{n}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{2\pi k}{n}} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{2\pi k}{n}}\end{pmatrix} \tag{3.3.7}$$

这表明矩阵$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & \mathrm{i}\\ -\mathrm{i} & -1\end{pmatrix}$把二维表示约化为两个一维表示的直和. 因而一维不可约表示的基矢为

$$(x,\ y)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & \mathrm{i}\\ -\mathrm{i} & -1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(x-\mathrm{i}y,\ \mathrm{i}x-y)$$

即$\frac{1}{\sqrt{2}}(x-\mathrm{i}y)$和$\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(x+\mathrm{i}y)$为第一个一维不可约表示和第$(n-1)$个一维不可约表示的基矢.

令

$$f_1(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}(x-\mathrm{i}y),\quad f_{-1}(\boldsymbol{r})=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(x+\mathrm{i}y)$$

在这个函数空间中的群算子为$\hat{P}(g)$，则

$$\hat{P}(g)f(\boldsymbol{r})=f(g^{-1}\boldsymbol{r})$$

对$\mathscr{C}_n$群，

$$\hat{P}(C_n^k)f(\boldsymbol{r})=f(C_n^{-k}\boldsymbol{r})$$

而

$$C_n^{-1}\boldsymbol{r}=(x,\ y,\ z)\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi k}{n} & -\sin\frac{2\pi k}{n} & 0\\ \sin\frac{2\pi k}{n} & \cos\frac{2\pi k}{n} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=(x',\ y',\ z') \tag{3.3.8}$$

由此得到

$$\begin{aligned}x' &=\cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)x+\sin\left(\frac{2\pi k}{n}y\right)\\ y' &=-\sin\left(\frac{2\pi k}{n}\right)x+\cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)y\\ z' &=z\end{aligned}$$

因而

$$\begin{aligned}&\hat{P}(C_n^k)f_1\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}(x'-\mathrm{i}y')\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)x+\sin\left(\frac{2\pi k}{n}\right)y\right)-\mathrm{i}\left(-\sin\left(\frac{2\pi k}{n}\right)x+\cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)y\right)\right]\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\frac{2\pi k}{n}}(x-\mathrm{i}y)\right]=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{2\pi k}{n}}f_1\end{aligned}$$

同样也可得到

$$\begin{aligned}&\hat{P}(C_n^k)f_{-1}\\&=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(x'+\mathrm{i}y')\\&=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left[\left(\cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)x+\sin\left(\frac{2\pi k}{n}\right)y\right)+\mathrm{i}\left(-\sin\left(\frac{2\pi k}{n}\right)x+\cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)y\right)\right]\\&=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{2\pi k}{n}}(x+\mathrm{i}y)\right]=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{2\pi k}{n}}f_{-1}\end{aligned}$$

从而证明$f_\pm$确实是这两个不可约表示的基矢. 一般特征标表把这两个不可约表示视为一个可约的二维表示，以(x, y)标记这个表示的基矢.

也可用三维空间中旋转轴R_x，R_y，R_z(它们分别表示以x，y，z轴为旋转轴)作为不可约表示的基矢，在C_n^k作用下它们分别与x，y，z同样变换，通常也标记在特征表的后面.

2° 二次齐次函数空间中的表示

点群不可约表示通常也可以二次齐次函数空间作为表示空间. 这是一个 6 维空间，基函数为$\{x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\}$. 利用(3.3.8)式，可得到在$C_n^k$作用下，6 个基函数的变化规则为

$$\left.\begin{aligned}P(C_n^k)x^2&=x'^2=(x\cos\alpha x-y\sin\alpha)^2\\P(C_n^k)y^2&=y'^2=(x\sin\alpha+y\cos\alpha)^2\\P(C_n^k)z^2&=z'^2=z^2\\P(C_n^k)xy&=x'y'=(x^2-y^2)\cos\alpha\sin\alpha+xy(2\cos^2\alpha-1)\\P(C_n^k)xz&=x'z'=xz\cos\alpha-yz\sin\alpha\\P(C_n^k)yz&=y'z'=xz\sin\alpha+yz\cos\alpha\end{aligned}\right\}\quad\alpha=\frac{2\pi k}{n}\qquad(3.3.9)$$

由此可得到 6 维空间$\{x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\}$可分解为$C_n$群的四个不变子空间，即

$$(\alpha):\ x^2+y^2=x'^2+y'^2,\quad z^2=z'^2$$

它们与z、R_z一样荷载了C_n群的一维恒等表示，即

$$\hat{P}(C_n^k)(x^2+y^2)=x^2+y^2$$

$$\hat{P}(C_n^k)z^2=z^2$$

全部表示矩阵都是 1.

$$(\beta): x'^2 - y'^2 = \cos 2\alpha(x^2 - y^2) - 2\sin 2\alpha xy$$

$$x'y' = \frac{1}{2}\sin 2\alpha(x^2 - y^2) + \cos 2\alpha xy$$

即$\{x^2-y^2, xy\}$是 C_n 群的二维不变子空间. 令

$$f_1 = (x^2 - y^2), \quad f_2 = 2xy$$

$$\hat{P}(C_n^k)(f_1, f_2) = (f_1, f_2)\begin{pmatrix} \cos\dfrac{4k\pi}{n} & \sin\dfrac{4k\pi}{n} \\ -\sin\dfrac{4k\pi}{n} & \cos\dfrac{4k\pi}{n} \end{pmatrix} \tag{3.3.10}$$

这个表示的特征标分量为

$$\chi(C_n^k) = 2\cos\frac{4k\pi}{n} \tag{3.3.11}$$

它的内积为

$$(\chi, \chi) = \frac{2}{n}\sum_{k=1}^{n}\cos^2\left(\frac{4k\pi}{n}\right) = 2$$

因而是可约表示. 利用酉矩阵(3.3.6)可约化为

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\dfrac{4\pi k}{4} & \sin\dfrac{4\pi k}{n} \\ -\sin\dfrac{4\pi k}{4} & \cos\dfrac{4\pi k}{n} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{4\pi k}{n}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{4\pi k}{n}} \end{pmatrix} \tag{3.3.12}$$

即 C_n 群的第 2 个和第$(n-2)$个不可约表示. 荷载这两个不可约表示的基函数为

$$(x^2 - y^2, 2xy)\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{pmatrix} = (x^2 - y^2 - 2ixy, i(x^2 - y^2) - 2xy)$$

令

$$f_2(\boldsymbol{r}) = i(x^2 - y^2) - 2xy, \quad f_{-2}(\boldsymbol{r}) = x^2 - y^2 - 2ixy$$

它们分别为这两个不可约表示的基函数. 如把这两个不可约表示视为一个二维表示 E_1, 则基函数为$\{x^2-y^2, xy\}$.

(γ): (yz, xz):

$$x'z' = \cos\alpha \cdot xz - \sin\alpha \cdot yz$$

$$y'z' = \sin\alpha \cdot xz + \cos\alpha \cdot yz$$

这说明$\{xz, yz\}$也可构成一个 C_n 群的二维不变子空间. 它们与$\{x, y\}$一样也荷载了第 1 个和第$(n-1)$个不可约表示. 因为 z 对 C_n 群是不变子空间, $\{xz, yz\}$与$\{x, y\}$在 C_n 群作用下显然以相同方式变换. 把这两个一维表示记为二维表示, $\{xz, yz\}$是它们的表示空间.

下面给出 $\mathscr{C}_5$, $\mathscr{C}_6$ 两个群的不可约表示特征标表, 最后两列给出不可约表示的基函数, 其中第一列是三维空间的基矢, 第二列是在二次齐次函数空间的基函数.

$\mathscr{C}_5$	E	C_5	C_5^2	C_5^3	C_5^4	三维空间基矢	六维空间基矢
A	1	1	1	1	1	$z,\ R_z$	$x^2+y^2,\ z^2$
E_1	1	ε	ε^2	ε^{2*}	ε^*	$(x,\ y)(R_x,\ R_y)$	$(yz,\ xz)$
	1	ε^*	ε^{2*}	ε^2	ε		
E_2	1	ε^2	ε^*	ε	ε^{2*}		$(x^2-y^2,\ xy)$
	1	ε^{2*}	ε	ε^*	ε^2		

$\varepsilon = e^{i\frac{2\pi}{5}}$

$\mathscr{C}_6$	E	C_6	C_6^2	$C_6^3=C_2$	$C_6^4=C_3^2$	C_6^5	三维空间基矢	六维空间基矢
A	1	1	1	1	1	1	$z,\ R_z$	$x^2+y^2,\ z^2$
B	1	-1	1	-1	1	-1		
E_1	1	ε	$-\varepsilon^*$	-1	$-\varepsilon$	ε^*	$(x,\ y)(R_x,\ R_y)$	$(xz,\ yz)$
	1	ε^*	$-\varepsilon$	-1	$-\varepsilon^*$	ε		
E_2	1	$-\varepsilon^*$	$-\varepsilon$	1	$-\varepsilon^*$	$-\varepsilon$		$(x^2-y^2,\ xy)$
	1	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^*$	1	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^*$		

$\varepsilon = e^{i\frac{\pi}{3}}$

2. D_2 群的不可约表示和基矢

第一类点群中的另一个 Abel 群是 D_2 群，它的不变子群为 $\mathscr{C}_2=\{e,\ C_2^{(1)}\}$，陪集为 $\{C_2^{(2)},\ C_2^{(3)}\}$，因而 D_2 群的基础表示为

$$D_{D_2}^{(d)}(C_2^{(1)}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D_{D_2}^{(d)}(C_2^{(i)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad i=2,3$$

$\mathscr{C}_2$ 群的不可约表示为

C_2	e	C_2
A	1	1
B	1	-1

因而由 $\mathscr{C}_2$ 群不可约表示 A 给出的诱导表示为

$$D_A^{\uparrow}(C_2^{(1)k}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\quad k=1,2$$

$$D_A^{\uparrow}(C_2^{(i)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad i=2,3$$

这是一个可约表示，利用矩阵 $A=A^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ 可约化为

$$A\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

于是得到两个一维不可约表示 A 和 B:

D_2	e	$C_2^{(1)}$	$C_2^{(2)}$	$C_2^{(3)}$
A	1	1	1	1
B_1	1	1	-1	-1

同样由 $\mathscr{C}_2$ 群的不可约表示 B 得到 D_2 群的诱导表示

$$D_B^{\uparrow}(e)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad D_B^{\uparrow}(C_2^{(1)})=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

$$D_B^{\uparrow}(C_2^{(i)})=\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix},\quad i=2,3$$

也是可约表示，同样可约化为两个一维不可约表示 B_2 和 B_3 的直和，得到 D_2 群不可约表示如下表:

D_2	E	$C_z(2)$	$C_y(2)$	$C_x(2)$	三维空间基矢	六维空间基矢
A	1	1	1	1		x^2+y^2,z^2
B_1	1	1	-1	-1	z,R_z	xy
B_2	1	-1	1	-1	y,R_y	xz
B_3	1	-1	-1	1	x,R_x	yz

对于 A 以外的三个一维表示用 B 标记，B_1 代表对 z 轴的二重转动是对称的表示，其它两个分别为对 y 轴和 x 轴的二重转动是对称的两个表示. 由变换公式

$$C_x(\pi)\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\-y\\-z\end{pmatrix},\quad C_y(\pi)\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\y\\-z\end{pmatrix}\quad C_z(\pi)\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\-y\\z\end{pmatrix}$$

可看到 x, y, z 分别为三个一维表示 B 的基矢，z 为 B_1 的基，y 为 B_2 的基，x 为 B_3 的基. 同样旋转轴 R_x 在 $C_x(\pi)$作用下不变，而在 $C_y(\pi)$，$C_z(\pi)$作用下变为 R_{-x}，R_y 在 $C_y(\pi)$作用下不变，在 $C_x(\pi)$和 $C_y(\pi)$作用下 R_y 变为 R_{-y}，R_z 亦然. 因而它们与 x, y, z 一样也分别为不可约表示 B_1, B_2, B_3 的基矢. 这些已列入 D_2 的特征标表中了.

容易看到在 $C_x(\pi)$, $C_y(\pi)$, $C_z(\pi)$作用下 x^2, y^2, z^2 保持不变，因而它们构成恒等表示 A 的基函数.

$C_x(\pi)$ 使 $xy\to-xy$, $xz\to-xz$, $yz\to yz$

$C_y(\pi)$ 使 $xy\to-xy$, $xz\to xz$, $yz\to-yz$

$C_z(\pi)$ 使 $xy\to xy$, $xz\to-xz$, $yz\to-yz$

因而 xy, xz 和 yz 分别为不可约表示 B_1, B_2, B_3 的基函数，这些也列入 D_2 特征标表的最后一列了.

3.3.2 D_n 群($n\geqslant3$)的不可约表示

当 n 为偶数时，令 $n=2m$，$(m>1)$，$D_n=D_{2m}$有$(m+3)$个类，因而有$(m+3)$个不可约表示，令它们的维数为 m_k，由不可约维数平方和等于群的阶数，得到

$$\sum_{k=1}^{m+3} m_k^2 = 4m \tag{3.3.13}$$

假定其中有 p 个一维不可约表示，其余高于一维的不可约表示的维数 $m_k \geqslant 2$ 的平方和满足方程

$$\sum_{k=1}^{m+3-p} m_k^2 = 4m - p \qquad (m_k \geqslant 2)$$

这个方程存在正整数解的条件为 $p=4$. 此时，$m_k=2$，即包括 4 个一维不可约表示，$(m-1)$个二维不可约表示.

若 n 为奇数，令 $n=2m+1(m\geqslant 1)$，则 D_{2m+1}群有 $m+2$ 个类. 因而公式(3.3.13)式变为

$$\sum_{k=1}^{m+2} m_k^2 = 4m + 2$$

若其中有 p 个一维表示，上式变为

$$\sum_{k=1}^{m+2-p} m_k^2 = 4m + 2 - p$$

它的正整数解是 $p=2$，$m_k=2$，于是一维表示数目为 $p=2$，二维不可约表示数目为 $m+2-2=m$.

归纳以上两点，得到 D_n 群不可约表示为：

当 $n=2m$ 时，4 个一维表示，$m-1$ 个二维表示.

当 $n=2m+1$ 时，2 个一维表示，m 个二维表示.

$\mathscr{C}_n$ 群为 D_n 群的不变子群，D_n 群的元素可表示为子群 $\mathscr{C}_n$ 及其陪集，即

$$D_n: \qquad D_n = \mathscr{C}_n + C_2^{(i)} \cdot \mathscr{C}_n$$

$$\mathscr{C}_n = \{E, C_n^1, C_n^2, \cdots, C_n^{n-1}\}$$

$$C_2^{(1)} \cdot \mathscr{C}_n = \{C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, \cdots, C_2^{(n)}\}$$

$\mathscr{C}_n$ 群的不可约表示在上节中已讨论过了，由它的表示可诱导出 D_n 群的二维表示，即 $\{D(C_n)_{\uparrow}^{D_n}\}$. 如果 $\mathscr{C}_n$ 群的表示 $D^{(k)}(C_n)$的基函数为f_k，则诱导表示 $D(C_n)_{\uparrow}^{D_n}$的基函数为

$$\{f_k, C_2^{(1)} f_k\}$$

而 D_n 群的两个或四个一维表示，一般是容易寻求的. 这样便在原则上解决了寻求 D_n 群的不可约表示问题.

下面以 D_4，D_5 群为例，直接由它们作用于空间(x, y, z)和$(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz)$利用诱导表示的方法寻求它们的不可约表示，然后再一般地讨论 D_n 群的不可约表示.

1. D_4 群的不可约表示

D_4 群有四个一维表示，一个二维表示. 首先在(x, y, z)三维空间中讨论 D_4 群的表示问题. 取 C_4 轴为 z 轴，四个二重轴在 x-y 平面上，它们之间夹角为$\frac{\pi}{4}$，取 $C_2^{(1)} = C_x(\pi)$，$C_2^{(3)} = C_y(\pi)$. 另两个为 x 与 y 轴的分角线和 x 与$(-y)$轴的分角线. 因而得到

$$C_4^{(k)} = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi k}{4} & -\sin\frac{2\pi k}{4} & 0 \\ \sin\frac{2\pi k}{4} & \cos\frac{2\pi k}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, 3$$

$$C_2^{(1)} = C_x(\pi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$C_2^{(3)} = C_y(\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$C_2^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$C_2^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

于是

$$C_4^{(k)}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha x - \sin\alpha y \\ \sin\alpha x + \cos\alpha y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}, \quad \alpha = \frac{2\pi k}{4}$$

$$C_2^{(1)}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}, \quad C_2^{(3)}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ y \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$$

$$C_2^{(2)}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ x \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}, \quad C_2^{(4)}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -y \\ -x \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$$

由这些公式可看出 D_4 群作用于空间(x, y, z)和二次齐次空间$(x^2, y^2, z^2, xy, yz, xz)$的变换为:

(1) x^2+y^2 和 z^2 在这些变换作用下是不变的，因而以它们为基矢给出恒等表示 A_1.

(2) z(同时也有旋转轴 R_z)在这些变换下是一个不变子空间，在 C_4^k 作用下 z 保持不变，在 $C_2^{(i)}$ 作用下 $z \to -z$，因而以它们为基矢给出 D_4 群的一维不可约表示 A_2(因为对 $C_2^{(i)}$ 是反对称的，记为 A_2).

(3) x^2-y^2 在这些变换下也是不变子空间，它在 C_4, C_4^3 和 $C_2^{(1)}$, $C_2^{(3)}$ 作用下变为 $-(x^2-y^2)$，在 C_4^2 和 $C_2^{(2)}$, $C_2^{(4)}$ 作用下保持不变，因而荷载了一维表示 B_1.

(4) xy 也是一个不变子空间，在 C_4, C_4^3 和 $C_2^{(1)}$, $C_2^{(3)}$ 作用下 xy 变为 $-xy$, C_4^2 和 $C_2^{(2)}$, $C_2^{(4)}$ 作用下保持不变. 因而荷载了一维表示 B_2.

(5) (x, y)(同样也有(R_x, R_y))构成 D_4 群的不变子空间，它们荷载了二维表示 E.

为了得到表示矩阵，对子空间(x, y)进行计算，即

$$C_4^{(k)}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{2\pi k}{4}\right)x-\sin\left(\frac{2\pi k}{4}\right)y\\ \sin\left(\frac{2\pi k}{4}\right)x+\cos\left(\frac{2\pi k}{4}\right)y\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(1)}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\-y\end{pmatrix},\quad C_2^{(3)}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\y\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(2)}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}y\\x\end{pmatrix},\quad C_2^{(4)}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-y\\-x\end{pmatrix}$$

由此得到表示矩阵：

$$D^E(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_4)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\pi}{2}&\sin\frac{\pi}{2}\\-\sin\frac{\pi}{2}&\cos\frac{\pi}{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}=D^{(E)}(C_4^3)$$

$$D^{(E)}(C_4^2)=\begin{pmatrix}\cos\pi&\sin\pi\\-\sin\pi&\cos\pi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_2^{(1)})=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_2^{(3)})=\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_2^{(2)})=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

$$D^E(C_2^{(4)})=\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix}$$

特征标为

$$\chi^{(E)}(E)=2,\quad \chi^{(E)}(C_4)=\chi^{(E)}(C_4^3)=0$$
$$\chi^{(E)}(C_4^2)=-2,\quad \chi^{(E)}(C_2^{(i)})=0$$

(6) 空间(xz, yz)在 D_4 群作用下也是不变空间，并给出了二维表示，它们的表示矩阵与(x, y)空间的表示矩阵是等价的. 为了看到这一结果令 D_4 群在空间(xz, yz)上的算子为 $\hat{P}(g)$，$g\in D_4$，则

$$\hat{P}(g)(xz, yz)=(xz, yz)D^E(g)$$

由此得到

$$D^{(E)}(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_4^1)=\tilde{D}^{(E)}(C_4^3)=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_4^2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_2^{(1)}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_2^{(2)}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_2^{(3)}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_2^{(4)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

这两种表示有相同的特征标，是等价表示.

下面列出了 D_4 群的特征标表：

D_4	E	C_4, C_4^3	$C_4^2=C_2$	$C_2^{(1)}$, $C_2^{(3)}$	$C_2^{(2)}$, $C_2^{(4)}$	三维空间基矢	六维空间基矢
A_1	1	1	1	1	1		x^2+y^2, z^2
A_2	1	1	1	-1	-1	z, R_z	
B_1	1	-1	1	1	-1		x^2-y^2
B_2	1	-1	1	-1	1		xy
E	2	0	-2	0	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	(xz, yz)

2. D_5 群的不可约表示

D_5 群有两个一维不可约表示，两个二维不可约表示. 取 C_5 轴为 z 轴，则

$$C_5^{(k)} = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi k}{5} & -\sin\frac{2\pi k}{5} & 0 \\ \sin\frac{2\pi k}{5} & \cos\frac{2\pi k}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad k=1, 2, 3, 4$$

五个二重轴在 x-y 平面上，取 $C_2^{(1)}=C_x(\pi)$，其它四个二重轴与 x 轴夹角为 $\frac{\pi(k-1)}{5}$, $k=2, 3, 4, 5$.

$$C_2^{(1)} = C_x(\pi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$C_2^{(k)} = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi(k-1)}{5} & \sin\frac{2\pi(k-1)}{5} & 0 \\ \sin\frac{2\pi(k-1)}{5} & -\cos\frac{2\pi(k-1)}{5} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad k=2, 3, 4, 5$$

经过与上节相同的分析可得到：

1° (x, y, z)空间

$\{z\}$构成 D_5 群不可约表示 A_2 的基，表示矩阵亦即特征标分量为

$$\chi^{(A_2)}(E)=\chi^{(A_2)}(C_5^k)=1, \chi^{(A_2)}(C_2^{(k)})=-1$$

(x, y)构成 D_5 群 2 维不可约表示 E_1 的基矢，表示矩阵为

$$D^{(E_1)}(E)=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$$

$$D^{(E_1)}(C_5^{(k)})=\begin{pmatrix}\cos\frac{2k\pi}{5} & -\sin\frac{2k\pi}{5}\\ \sin\frac{2k\pi}{5} & \cos\frac{2k\pi}{5}\end{pmatrix}$$

$$D^{(E_1)}(C_2^{(k)})=\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi}{5}(k-1) & \sin\frac{2\pi}{5}(k-1)\\ \sin\frac{2\pi}{5}(k-1) & -\cos\frac{2\pi}{5}(k-1)\end{pmatrix}$$

特征标为

$$\chi^{(E_1)}(E)=2 \quad ,\chi^{(E_1)}(C_5^k)=2\cos\frac{2\pi}{5}k \quad ,\chi^{(E_1)}(C_2^{(k)})=0$$

2° $(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz)$空间

x^2+y^2 和 z^2 都构成了 D_5 群不可约表示 A_1 的基矢，表示矩阵也就是特征标为

$$\chi^{(A_1)}(E)=\chi^{(A_1)}(C_5^k)=\chi^{(A_1)}(C_2^{(k)})=1$$

(xz, yz)构成了 D_5 群不可约表示 E_1 的基矢，表示矩阵为

$$D^{(E_1)}(E)=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$$

$$D^{(E_1)}(C_5^{(k)})=\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi}{5}k & -\sin\frac{2\pi}{5}k\\ \sin\frac{2\pi}{5}k & \cos\frac{2\pi}{5}k\end{pmatrix}$$

$$D^{(E_1)}(C_2^{(k)})=\begin{pmatrix}-\cos\frac{2\pi}{5}(k-1) & -\sin\frac{2\pi}{5}(k-1)\\ -\sin\frac{2\pi}{5}(k-1) & \cos\frac{2\pi}{5}(k-1)\end{pmatrix}$$

显然特征标与(x, y)为基的 E_1 表示是相同的，因而它们互为等价表示.

$(x^2-y^2, 2xy)$构成 D_5 群的不可约表示 E_2 的基矢，表示矩阵为

$$D^{(E_2)}(E)=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix},\quad D^{(E_2)}(C_5^{(k)})=\begin{pmatrix}\cos2\frac{2\pi}{5}k & -\sin2\frac{2\pi}{5}k\\ \sin2\frac{2\pi}{5}k & \cos2\frac{2\pi}{5}k\end{pmatrix}$$

$$D^{(E_2)}(C_2^{(k)})=\begin{pmatrix}\cos2\frac{2\pi}{5}(k-1) & \sin2\frac{2\pi}{5}(k-1)\\ \sin2\frac{2\pi}{5}(k-1) & -\cos2\frac{2\pi}{5}(k-1)\end{pmatrix}$$

特征标为

$$\chi^{(E_2)}(E)=2,\chi^{(E_2)}(C_5^{(k)})=2\cos2\frac{2\pi}{5}k,\chi^{(E_2)}(C_2^{(k)})=0$$

在下面给出了 D_5 群的特征标表:

D_5	E	C_5, C_5^4	C_5^2, C_5^3	$C_2^{(k)}$	三维空间基矢	六维空间基矢
A_1	1	1	1	1		$x^2+y^2, z2$
A_2	1	1	1	-1	z, R_z	
E_1	2	$2\cos\frac{2\pi}{5}$	$2\cos\frac{4\pi}{5}$	0	$(x, y)(R_x, R_z)$	(xz, yz)
E_2	2	$2\cos\frac{4\pi}{5}$	$2\cos\frac{2\pi}{5}$	0		(x^2-y^2, xy)

3. D_n 群不可约表示的一般形式

下面利用由子群 $\mathscr{C}_n$ 的不可约表示，诱导出 D_n 群表示的方法，求出 D_n 群的一般表示.

$$D_n=\mathscr{C}_n\oplus C_2^{(1)}\cdot\mathscr{C}_n=\{C_n^k, k=1,2,\cdots,n\}\oplus\{C_2^{(k)}, k=1,2,\cdots,n\}$$

$\mathscr{C}_n$ 群的不可约表示为

$\mathscr{C}_n$	C_n^k	$k=1,2,\cdots,n$
A_l	$e^{i2\pi lk/n}$	$l=0,1,2,\cdots,(n-1)$

由于 D_n 群存在二个陪集$\{\mathscr{C}_n$ 和 $C_2^{(1)}\cdot\mathscr{C}_n\}$，因而它的基础表示是二维表示，容易得到这个二维表示为

$$D^{(d)}(g)=\begin{cases}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}, & g\in\mathscr{C}_n\\ \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, & g\in C_2^{(1)}\cdot\mathscr{C}_n=\{C_2^{(i)}\}\end{cases}$$

利用(3.2.13)式得到由 $\mathscr{C}_n$ 群的不可约表示 A_l 诱导出的 D_n 群的诱导表示 $D^{(A_l\mapsto E_l)}$ 为

$$D^{(A_l\mapsto E_l)}(g)_{\alpha\beta}=D^{(d)}(g)_{\alpha\beta}\cdot A_l(h_\beta^{(\alpha)}(g))$$

其中(见(3.2.5)式)

$$h_\beta^{(\alpha)}=g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\beta$$

而陪集代表元素只有两个,

$$g_1=g_1^{-1}=E,\quad g_2=g_2^{-1}=C_2^{(1)}$$

因而

$$h_1^{(1)}(g)=g\in C_n,\quad h_2^{(1)}(C_2^p)=C_2^{(p)}\cdot C_2^{(1)}=C_n^{(p-1)}$$

$$h_1^{(1)}(C_2^p)=C_n^{-(p-1)},\quad h_2^{(1)}(g)=g\in\mathscr{C}_n$$

由此得到诱导表示的表示矩阵为

$$D^{(A_l\mapsto E_l)}(C_n^k)_{11}=e^{i\frac{2\pi kl}{n}},\quad D^{(A_l\mapsto E_l)}(C_n^k)_{22}=e^{-i\frac{2\pi kl}{n}}$$

$$D^{(A_l\mapsto E_l)}(C_2^{(k)})_{12}=e^{i\frac{2\pi(k-1)l}{n}},\quad D^{(A_l\mapsto E_l)}(C_2^{(k)})_{21}=e^{-i\frac{2\pi(k-1)l}{n}}$$

这便得到了由 A_l 诱导出的二维表示 E_l 的表示矩阵，下面列出这种表示矩阵和特征标(令 $\varepsilon = e^{i\frac{2\pi}{n}}$)：

D_n	C_n^k	$C_2^{(k)}$
E_l	$\begin{pmatrix} \varepsilon^{kl} & 0 \\ 0 & \varepsilon^{*kl} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \varepsilon^{(k-1)l} \\ \varepsilon^{*(k-1)l} & 0 \end{pmatrix}$

$\chi^{(E_l)}$	C_n^k	$C_2^{(k)}$	E
E_l	$2\cos kl\dfrac{2\pi}{n}$	0	2

对于 $l=0$ 所得到的诱导表示为

D_n	C_n^k	$C_2^{(k)}$	E
E_0	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

特征标的内积为

$$(\chi^{(E_0)}, \chi^{(E_0)}) = \frac{1}{2n}\sum_{g \in D_n}\chi^{(E_0)}(g)\chi^{(E_0)}(g) = \frac{1}{2n}[4 + 4(n-1)] = 2$$

可见它是可约表示，利用矩阵 $A = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ 可约化为两个不可约表示的直和，它们就是 D_n 群($n=2m$ 或 $2m+1$)的两个一维表示，标记为 A_1 和 A_2

当 $n=2m$，$l=m$ 时，诱导表示为

D_{2m}	C_{2m}^k	$C_2^{(k)}$	E
E_m	$\begin{pmatrix} (-1)^k & 0 \\ 0 & (-1)^k \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & (-1)^{k-1} \\ (-1)^{k-1} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

特征标内积也是 2，因而也是可约表示，可约化为两个不可约表示的直和. 因此 $n=2m$ 的 D_{2m} 群存在四个一维不可约表示，除由 $l=0$ 得到的 A_1 和 A_2 外，再加上这里得到的两个一维表示 B_1，B_2.

l 和 $(n-l)$ 给出的两个二维诱导表示有相同的特征标：

D_n	E	C_n^k	$C_2^{(k)}$
χ^l	2	$2\cos kl\dfrac{2\pi}{n}$	0
$\chi^{(2n-l)}$	2	$2\cos kl\dfrac{2\pi}{n}$	0

因而它们是等价表示. 因而对 $n=2m$ 的 D_{2m} 群取 $l=1, 2, \cdots, m-1$；对 $n=2m+1$ 的 D_{2m+1} 群取 $l=1, 2, \cdots, m$. 由诱导表示就得到了 D_n 群的全部二维表示.

由表示 E_l 特征标的内积得到

$$(\chi^{(E_l)}, \chi^{(E_l)}) = \frac{1}{2n}\sum_{k=1}^{n} 4\cos^2 kl\frac{2\pi}{n} = 1$$

证明二维诱导表示是不可约的.

3.4 T群和O群的不可约表示

在本节中讨论正四面体群(T群)、正八面体群(O群)的不可约表示，由于正二十面体群(I群)元素太多，就不讨论它的不可约表示了.

3.4.1 正四面体群(T群)的不可约表示

正四面体群有12个元素，其中由每一个面中心与相对顶点连线构成的三重轴为四个$C_3^{(i)k}$，$i=1,2,3,4$；$k=1,2$. 每一棱与它相对的棱的中点连线构成一个二重轴，共三个二重轴，$C_2^{(i)}$，$i=1,2,3$. 四个三重轴是等价轴，三个二重轴也是等价轴，因而共有四个类，即$\{E\}$，$\{C_3^{(i)}, i=1,2,3,4\}$，$\{C_3^{(i)2}, i=1,2,3,4\}$，$\{C_2^{(i)}, i=1,2,3\}$. 因而有四个不等价的不可约表示. 由

$$\sum_{\alpha=1}^{4} m_\alpha^2 = 12$$

唯一得到它有三个一维表示和一个三维表示.

在图3.4.1中给出了立方体内的正接四面体. 四面体的四个顶点在立方体不相邻的四个顶点上，以立方体中心为原点，选取一垂直立方体相对表面的三个向量为x，y，z轴，它们自然通过内接正四面体的两个相对的棱的中点，构成T群的三个二重轴，因而

$$C_2^{(1)} = C_x(\pi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$C_2^{(2)} = C_y(\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$C_2^{(3)} = C_y(\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

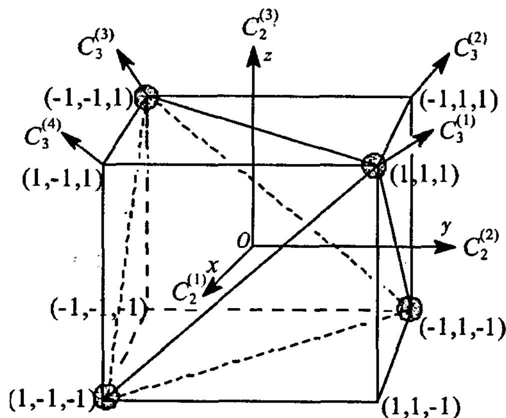


图3.4.1 立方体内正接四面体

四个三重轴是立方体相对顶点的连线. 假定立方体边长为2，八个顶点的坐标为

$$(1,1,1),\quad(-1,-1,-1),\quad(-1,1,1),\quad(1,-1,-1)$$
$$(-1,-1,1),\quad(1,1,-1),\quad(1,-1,1),\quad(-1,1,-1)$$

顶点$(1,1,1)$与顶点$(-1,-1,-1)$的连线为第一个三重轴$C_3^{(1)}$；顶点$(-1,1,1)$与顶点$(1,-1,-1)$连线为第二个三重轴$C_3^{(2)}$；顶点$(-1,-1,1)$与$(1,1,-1)$的连线为第三个三重轴$C_3^{(3)}$；顶点$(1,-1,1)$与顶点$(-1,1,-1)$的连线为第四个三重轴$C_3^{(4)}$.

$C_3^{(1)}$轴的方向余弦为$\left(l_1=\dfrac{1}{\sqrt{3}}, m_1=\dfrac{1}{\sqrt{3}}, n_1=\dfrac{1}{\sqrt{3}}\right)$；

$C_3^{(2)}$ 轴的方向余弦为$\left(l_2 = \frac{1}{\sqrt{3}},\ m_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}},\ n_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$；

$C_3^{(3)}$ 轴的方向余弦为$\left(l_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}},\ m_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}},\ n_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$；

$C_3^{(4)}$ 轴的方向余弦为$\left(l_4 = -\frac{1}{\sqrt{3}},\ m_4 = \frac{1}{\sqrt{3}},\ n_4 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$.

利用公式(2.1.8)可得到这些转动的矩阵表示，即

$$C_3^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},\quad C_3^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$C_3^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},\quad C_3^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

把这些变换作用于 $\boldsymbol{r}$，得到以(x, y, z)为基的三维表示，记为 T，它的表示矩阵为

$$D^{(T)}(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\quad D^{(T)}(C_2^{(1)}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$D^{(T)}(C_2^{(2)}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},\quad D^{(T)}(C_2^{(3)}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D^{(T)}(C_3^{(1)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad D^{(T)}(C_3^{(2)}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$D^{(T)}(C_3^{(3)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad D^{(T)}(C_3^{(4)}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$D^{(T)}(C_3^{(i)2}) = D^{(T)}(C_3^{(i)})^2$$

特征标为

$$\chi^{(T)}(E) = 3,\quad \chi^{(T)}(C_2^{(i)}) = -1,\quad \chi^{(T)}(C_3^{(i)}) = \chi^{(T)}(C_3^{(i)2}) = 0$$

由特征标内积的公式(1.11.18)式得到

$$(\chi^{(T)}, \chi^{(T)}) = \frac{1}{12}\sum_{g\in T}\chi^{(T)}(g)^*\chi^{(T)}(g) = \frac{1}{12}(9+3) = 1$$

可看到这是一个三维不可约表示.

群 T 作用于二次齐次函数空间$(x^2, y^2, z^2, xz, xz, yz)$把它分为两个不变子空间，即$(xy, xz, yz)$和$(x^2, y^2, z^2)$. 容易得到群 T 的算子作用于空间(xy, xz, yz)为

$$\hat{P}(C_2^{(1)})xy = -xy,\quad \hat{P}(C_2^{(1)})xz = -xz,\quad \hat{P}(C_2^{(1)})yz = yz$$

$$\hat{P}(C_2^{(2)})xy = -xy,\quad \hat{P}(C_2^{(2)})xz = xz,\quad \hat{P}(C_2^{(2)})yz = -yz$$

$$\hat{P}(C_2^{(3)})xy = xy, \quad \hat{P}(C_2^{(3)})xz = -xz, \quad \hat{P}(C_2^{(3)})yz = -yz$$

$$\begin{pmatrix}\hat{P}(C_3^{(1)})\\ \hat{P}(C_3^{(2)})\\ \hat{P}(C_3^{(3)})\\ \hat{P}(C_3^{(4)})\end{pmatrix}xy = \begin{pmatrix}xz\\ xz\\ -xz\\ -xz\end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix}\hat{P}(C_3^{(1)})\\ \hat{P}(C_3^{(2)})\\ \hat{P}(C_2^{(3)})\\ \hat{P}(C_3^{(4)})\end{pmatrix}xz = \begin{pmatrix}yz\\ -yz\\ yz\\ -yz\end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix}\hat{P}(C_3^{(1)})\\ \hat{P}(C_3^{(2)})\\ \hat{P}(C_2^{(3)})\\ \hat{P}(C_3^{(4)})\end{pmatrix}yz = \begin{pmatrix}xy\\ -xy\\ -xy\\ xy\end{pmatrix}$$

由此得到(xy, xz, yz)同样为三维表示的基，表示矩阵为

$$D^{(T)}(E) = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}, \qquad D^{(T)}(C_2^{(1)}) = \begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$D^{(T)}(C_2^{(2)}) = \begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}, \qquad D^{(T)}(C_2^{(3)}) = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$D^{(T)}(C_3^{(1)}) = \begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}, \qquad D^{(T)}(C_3^{(2)}) = \begin{pmatrix}0 & 0 & -1\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\end{pmatrix}$$

$$D^{(T)}(C_3^{(3)}) = \begin{pmatrix}0 & 0 & -1\\ -1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}, \qquad D^{(T)}(C_3^{(4)}) = \begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ -1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\end{pmatrix}$$

特征标为

$$\chi^{(T)}(E) = 3, \quad \chi^{(T)}(C_3^{(i)}) = \chi^{(T)}(C_3^{(i)2}) = 0, \quad \chi^{(T)}(C_2^{(i)}) = -1$$

可见由(xy, xz, yz)为基的三维表示与由(x, y, z)为基的三维表示是等价表示.

对于子空间(x^2, y^2, z^2)可得到

$$\hat{P}(C_2^{(i)})x^2 = x^2, \quad \hat{P}(C_2^{(i)})y^2 = y^2, \quad \hat{P}(C_2^{(i)})z^2 = z^2$$

$$\hat{P}(C_3^{(i)})x^2 = z^2, \quad \hat{P}(C_3^{(i)})y^2 = x^2, \quad \hat{P}(C_3^{(i)})z^2 = y^2$$

由此可得到:

(1) $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$ 是 T 群的不变量，即

$$\hat{P}(g)r^2 = r^2, \quad g \in T$$

因而 r^2 为 T 群恒等表示 A 的基函数.

(2) 子空间(x^2, y^2, z^2)除去 r^2 之后，尚有二维余空间. 令 $f_1 = (x^2 - y^2)$, $f_2 = (2z^2 - x^2 - y^2)$，则

$$\begin{aligned}\hat{P}(C_3^{(i)})f_1 &= \hat{P}(C_3^{(i)})(x^2 - y^2) = z^2 - x^2\\ &= \frac{1}{2}(2z^2 - x^2 - y^2) - \frac{1}{2}(x^2 - y^2)\\ &= \frac{1}{2}f_1 - \frac{1}{2}f_2\end{aligned}$$

$$\hat{P}(C_3^{(i)})f_2 = \hat{P}(C_3^{(i)})(2z^2 - x^2 - y^2)$$

$$
\begin{aligned}
&=2y^2-z^2-x^2\\
&=-\frac{1}{2}(2z^2-x^2-y^2)-\frac{3}{2}(x^2-y^2)\\
&=-\frac{3}{2}f_1-\frac{1}{2}f_2
\end{aligned}
$$

可见(f_1,f_2)荷载了 T 群的一个二维表示，记为 E，表示矩阵为

$$
D^{(E)}(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad D^{(E)}(C_2^{(i)})=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},
$$

$$
D^{(E)}(C_3^{(i)})=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{3}{2}\\ \frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad D^{(E)}(C_3^{(i)2})=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{3}{2}\\ -\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix}
$$

特征标为

$$
\chi^{(E)}(E)=2,\chi^{(E)}(C_2^{(i)})=2,\chi^{(E)}(C_3^{(i)})=-1,\chi^{(E)}(C_3^{(i)2})=-1
$$

特征标的内积由(1.11.18)式为

$$
(\chi^{(E)},\chi^{(E)})=\frac{1}{12}\sum_{g\in T}\chi^{(E)}(g)^*\chi^{E}(g)=\frac{1}{12}(4+3\cdot 4+8\cdot 1)=2
$$

从而得到二维表示 E 是可约表示，利用矩阵

$$
A=\begin{pmatrix}1&\mathrm{i}\sqrt{3}\\ \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{3}}&1\end{pmatrix},\quad A^{-1}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&-\mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\mathrm{i}\frac{1}{2\sqrt{3}}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}
$$

可约化这个二维表示为两个一维表示的直和，即

$$
A^{-1}\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{3}{2}\\ \frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix}A=\begin{pmatrix}e^{\mathrm{i}\frac{2\pi}{3}}&0\\0&e^{\mathrm{i}\frac{4\pi}{3}}\end{pmatrix}=e^{\mathrm{i}\frac{2\pi}{3}}\oplus e^{\mathrm{i}\frac{4\pi}{3}}
$$

基矢变换为

$$
\begin{aligned}
(f_1',f_2')&=(f_1,f_2)\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&-\mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\mathrm{i}}{2\sqrt{3}}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\\
&=\left(\frac{1}{2}f_1-\frac{\mathrm{i}}{2\sqrt{3}}f_2,\ -\frac{\mathrm{i}\sqrt{3}}{2}f_1+\frac{1}{2}f_2\right)
\end{aligned}
$$

$$
f_1'=\frac{1}{2}f_1-\frac{\mathrm{i}}{2\sqrt{3}}f_2=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{3}}\right)x^2-\frac{1}{2}\left(1-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{3}}\right)y^2-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{3}}z^2
$$

$$
f_2'=-\mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}f_1+\frac{1}{2}f_2=-\frac{1}{2}(1+\mathrm{i}\sqrt{3})x^2-\frac{1}{2}(1-\mathrm{i}\sqrt{3})y^2+z^2
$$

它们分别为一维不可约表示 B_1 和 B_2 的基函数.

这样便得到了 T 群的全部不可约表示. 下面列出了 T 群的特征标表:

T 群	E	$4C_3^{(i)}$	$4C_3^{(i)2}$	$3C_2^{(i)}$	三维空间基矢	六维空间基矢
A	1	1	1	1		$x^2+y^2+z^2$
$E\begin{cases}B_1\\B_2\end{cases}$ B_1	1	ε	ε^*	1		$(2z^2-x^2-y^2, x^2-y^2)$
B_2	1	ε^*	ε	1		
T	3	0	0	−1	$(x, y, z)(R_x, R_y, R_z)$	(xy, xz, yz)

3.4.2 正八面体群(O 群)的不可约表示

在图 3.4.2 中给出了正立方体中内接正八面体及其坐标和旋转轴, O 群的三重轴就是 T 群的三重轴, 四重轴为 x, y, z 轴, 这便得到了第二章中给出的 O 群的 24 个元素, 即

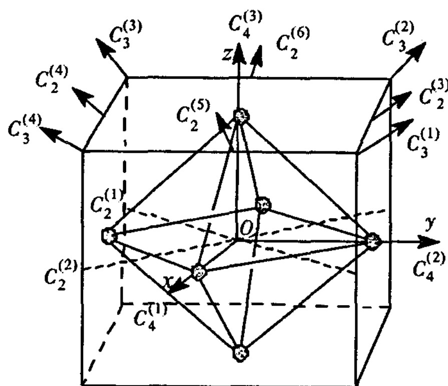


图 3.4.2 正立方体内接正八面体

$$C_4^{(1)k}=C_x\left(\frac{k2\pi}{4}\right)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\left(\frac{k2\pi}{4}\right) & -\sin\left(\frac{k2\pi}{4}\right)\\ 0 & \sin\left(\frac{k2\pi}{4}\right) & \cos\left(\frac{k2\pi}{4}\right)\end{pmatrix},\quad (k=1,2,3)$$

$$C_4^{(2)k}=C_y\left(\frac{k2\pi}{4}\right)=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{k2\pi}{4}\right) & 0 & \sin\left(\frac{k2\pi}{4}\right)\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\left(\frac{k2\pi}{4}\right) & 0 & \cos\left(\frac{k2\pi}{4}\right)\end{pmatrix}$$

$$C_4^{(3)k}=C_z\left(\frac{k2\pi}{4}\right)=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{k2\pi}{4}\right) & -\sin\left(\frac{k2\pi}{4}\right) & 0\\ \sin\left(\frac{k2\pi}{4}\right) & \cos\left(\frac{k2\pi}{4}\right) & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$C_3^{(1)}=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\quad C_3^{(2)}=\begin{pmatrix}0&0&-1\\-1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}$$

$$C_3^{(3)}=\begin{pmatrix}0&0&-1\\1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix},\quad C_3^{(4)}=\begin{pmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix}$$

$$C_3^{(1)2}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix},\quad C_3^{(2)2}=\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&1\\-1&0&0\end{pmatrix}$$

$$C_3^{(3)2}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&-1\\-1&0&0\end{pmatrix},\quad C_3^{(4)2}=\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&-1\\1&0&0\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(1)}=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\quad C_2^{(2)}=\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(3)}=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad C_2^{(4)}=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&-1\\0&-1&0\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(5)}=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&-1&0\\1&0&0\end{pmatrix},\quad C_2^{(6)}=\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&-1&0\\-1&0&0\end{pmatrix}$$

三个四重轴是等价轴，$C_4^{(i)}$ 与 $C_4^{(i)3}(i=1,2,3)$为一类，$C_4^{(i)2}(i=1,2,3)$为一类，四个三重轴也是等价轴，$C_3^{(i)}$，$C_3^{(i)2}$ 为一类，三个由相对棱中点连线构成的六个二重轴为等价轴，它们为一类，单位元为一类，共五类，即

$$\{E\},\quad \{C_3^{(i)},\ C_3^{(i)2},\ i=1,2,3,4\},\quad \{C_4^{(i)},\ C_4^{(i)3},\ i=1,2,3\}$$

$$\{C_4^{(i)2},\ i=1,2,3\},\ \{C_2^{(i)},\ i=1,2,\cdots,6\}$$

因而存在五个不可约表示，由不可约表示维数的平方和等于群的阶，可得到这些不可约表示的维数为一维不可约表示两个，二维不可约表示一个，三维不可约表示两个. 这些不可约表示分别记为 A_1，A_2，E，T_1，T_2.

由群元素的矩阵表示可看出(x, y, z)（同时也有 R_x，R_y，R_z）是三维不可约表示下的基矢. 表示矩阵为

$$D^{(T_1)}(E)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\quad D^{(T_1)}(C_4^{(1)})=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(T_1)}(C_4^{(2)})=\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix},\quad D^{(T_1)}(C_4^{(3)})=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$D^{(T_1)}(C_3^{(1)})=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix},\quad D^{(T_1)}(C_3^{(2)})=\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&1\\-1&0&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(T_1)}(C_3^{(3)})=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&-1\\-1&0&0\end{pmatrix},\quad D^{(T_1)}(C_3^{(4)})=\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&-1\\1&0&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(T_1)}(C_2^{(1)})=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\quad D^{(T_1)}(C_2^{(2)})=\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$D^{(T_1)}(C_2^{(3)})=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad D^{(T_1)}(C_2^{(4)})=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&-1\\0&-1&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(T_1)}(C_2^{(5)})=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&-1&0\\1&0&0\end{pmatrix},\quad D^{(T_1)}(C_2^{(6)})=\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&-1&0\\-1&0&0\end{pmatrix}$$

特征标为

$$\chi^{(T_1)}(E)=3,\quad \chi^{(T_1)}(C_4^{(i)})=\chi^{T_1}(C_4^{(i)3})=1,\quad \chi^{(T_1)}(C_4^{(i)2})=-1$$

$$\chi^{(T_1)}(C_3^{(i)})=\chi^{(T_1)}(C_3^{(i)2})=0,\quad \chi^{(T_1)}(C_2^{(i)})=-1$$

特征标的内积

$$(\chi^{(T_1)},\chi^{(T_1)})=\frac{1}{24}(9+6\cdot 1+3\cdot 1+6\cdot 1)=1$$

可见表示 T_1 是不可约表示.

对于二次齐次函数空间，在 O 群作用下分为两个子空间，即 $(xy,\ xz,\ yz)$ 和 $(x^2,\ y^2,\ z^2)$. $(xy,\ xz,\ yz)$ 给出三维不可约表示 T_2，它的表示矩阵为

$$D^{(T_2)}(E)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\quad D^{(T_2)}(C_4^{(1)})=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$D^{(T_2)}(C_4^{(2)})=\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&-1&0\\1&0&0\end{pmatrix},\quad D^{(T_2)}(C_4^{(3)})=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(T_2)}(C_3^{(1)})=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\quad D^{(T_2)}(C_3^{(2)})=\begin{pmatrix}0&0&-1\\1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(T_2)}(C_3^{(3)})=\begin{pmatrix}0&0&-1\\-1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\quad D^{(T_2)}(C_3^{(4)})=\begin{pmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(T_2)}(C_2^{(1)}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D^{(T_2)}(C_2^{(2)}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$D^{(T_2)}(C_2^{(3)}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D^{(T_2)}(C_2^{(4)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D^{(T_2)}(C_2^{(5)}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad D^{(T_2)}(C_2^{(6)}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

特征标为

$$\chi^{(T_2)}(E) = 3, \chi^{(T_2)}(C_4^{(i)}) = \chi^{(T_2)}(C_4^{(i)3}) = -1, \chi^{(T_2)}(C_4^{(i)2}) = -1$$

$$\chi^{(T_2)}(C_3^{(i)}) = \chi^{(T_2)}(C_3^{(i)2}) = 0, \chi^{(T_2)}(C_2^{i}) = 1$$

特征标的内积

$$(\chi^{(T_2)}, \chi^{(T_2)}) = 1$$

因而 T_2 是不可约表示.

对于子空间$\{x^2, y^2, z^2\}$可看到

$$\hat{P}(g)(x^2+y^2+z^2) = (x^2+y^2+z^2)$$

即 $x^2+y^2+z^2$ 为恒等表示的基. 而$\{(x^2-y^2), (2z^2-x^2-y^2)\}$为不可约表示 E 的基. 为了得到表示矩阵, 下面给出群算子 $\hat{P}(g)$对(x^2, y^2, z^2)的作用结果.

$$\hat{P}(C_4^{(3)})\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^2 \\ z^2 \\ y^2 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}(C_4^{(2)})\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z^2 \\ y^2 \\ x^2 \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}(C_4^{(1)})\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y^2 \\ x^2 \\ z^2 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}(C_3^{(i)})\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z^2 \\ x^2 \\ y^2 \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}(C_2^{(3)})\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^2 \\ z^2 \\ y^2 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}(C_2^{(4)})\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^2 \\ z^2 \\ y^2 \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}(C_2^{(1)})\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y^2 \\ x^2 \\ z^2 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}(C_2^{(2)})\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y^2 \\ x^2 \\ z^2 \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}(C_2^{(5)})\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z^2 \\ y^2 \\ x^2 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}(C_2^{(6)})\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z^2 \\ y^2 \\ x^2 \end{pmatrix}$$

令$f_1 = x^2 - y^2, f_2 = 2z^2 - x^2 - y^2$, 于是

$$\hat{P}(C_4^{(3)})f_1 = x^2 - z^2 = -\frac{1}{2}(2z^2 - x^2 - y^2) + \frac{1}{2}(x^2 - y^2)$$

$$=\frac{1}{2}f_1-\frac{1}{2}f_2$$

$$\hat{P}(C_4^{(3)})f_2=2y^2-x^2-z^2=-\frac{1}{2}(2z^2-x^2-y^2)-\frac{3}{2}(x^2-y^2)$$

$$=-\frac{3}{2}f_1-\frac{1}{2}f_2$$

因而表示矩阵为

$$D^{(E)}(C_4^{(1)})=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{3}{2}\\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

经过类似计算可得到

$$D^{(E)}(C_4^{(2)})=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{3}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad D^{(E)}(C_4^{(3)})=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{3}{2}\\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_3^{(i)})=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{3}{2}\\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad D^{(E)}(C_2^{(3)})=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{3}{2}\\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_2^{(4)})=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{3}{2}\\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad D^{(E)}(C_2^{(1)})=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_2^{(2)})=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad D^{(E)}(C_2^{(5)})=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{3}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$D^{(E)}(C_2^{(6)})=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{3}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

由此得到特征标为

$$\chi^{(E)}(E)=2,\chi^{(E)}(C_4^{(i)})=\chi^{E}(C_4^{(i)3})=0,\quad \chi^{(E)}(C_4^{(i)2})=2$$

$$\chi^{(E)}(C_3^{(i)})=\chi^{(E)}(C_3^{(i)2})=-1,\quad \chi^{(E)}(C_2^{(i)})=0$$

特征标的内积为 1，因此表示 E 也是不可约表示.

最后剩下一个一维表示 A_2，在空间(x, y, z)和二次齐次空间$(xy, xz, yz, x^2, y^2, z^2)$中都不存在不可约表示 A_2，实际上它的基矢为 xyz，容易得到 $C_4^{(i)k}xyz=-xyz\ (k=1, 3)$，$C_4^{(i)2}xyz=xyz$，$C_2^{(i)}xyz=-xyz$，$C_3^{(i)k}xyz=xyz\ (k=1, 2)$.

这样便得到了 O 群的全部不可约表示矩阵.

下面由这些不可约表示给出了 O 群的特征标表，并在表中列出了不可约基矢：

O 群	E	$C_4^{(i)}, C_4^{(i)3}$	$C_4^{(i)2}$	$C_3^{(i)}=C_3^{(i)2}$	$C_2^{(i)}$	三维空间基矢	六维空间基矢	
A_1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2+z^2$	
A_2	1	-1	1	1	-1			xyz
E	2	0	2	-1	0		$(2z^2-x^2-y^2,$ $x^2-y^2)$	
T_1	3	1	-1	0	-1	(x, y, z) (R_x, R_y, R_z)		
T_2	3	-1	-1	0	1		(xy, xz, yz)	

由于二次齐次空间的基矢($x, y, x, z, y, z, x^2, y^2, z^2$)并非正交归一化基矢，前面在此基矢上得到的不可约表示都不是酉表示.

3.4.3　利用诱导表示方法由 T 群得到 O 群的表示

上面几节对点群在一定坐标系中找到群元素的变换矩阵，而后把它作用于空间(x, y, z)或$(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz)$，寻求到点群的不可约表示. 下面从 T 群表示出发，利用诱导表示的方法寻找 O 群的表示，以便进一步了解诱导表示的使用.

T 群是 O 群的不变子群，利用 T 群及其陪集可把 O 群元素分为两个子集，即

$$O\text{ 群}:\begin{cases}T=\{E,\ C_3^{(i)},\ C_3^{(i)2},\ i=1,2,3,4;\ C_4^{(i)2},\ k=1,2,3\}\\ C_2^{(1)}T=\{C_2^{(i)},\ i=1,2,\cdots,6,\ C_4^{(i)},\ C_4^{(i)3},\ i=1,2,3\}\end{cases}$$

由(3.2.7)式可得到 O 群的基础表示

$$G^{(d)}(g)_{lj}=\begin{cases}1, & l=j\\ 0, & l\neq j\end{cases}\qquad (g\cdot g_i\in g_jT)$$

由此可得到

$$G^d(E)=G^d(C_3^{(i)})=G^d(C_3^{(i)2})=G^d(C_4^{(i)2})=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$G^d(C_2^i)=G^d(C_4^{(i)2})=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

由(3.2.7)式得到由 T 群的不可约表示 H 诱导出的 O 群的表示 $H_\uparrow^O$ 为

$$H_\uparrow^O(g)_{\alpha i,\beta j}=G^d(g)_{\alpha\beta}H(h_\beta(g))_{ij}$$

其中 $g\cdot g_\alpha=g_\beta\cdot h_\alpha(g)$，$h_\alpha\in T$ 或者写为 $h_\alpha^{(\beta)}(g)=g_\beta^{-1}\cdot g\cdot g_\alpha$，$g_\alpha$，$g_\beta\in O$，不属于 T 群，它们为陪集代表元素.

$$g_\alpha=\begin{cases}E, & \alpha=1\\ C_2^{(1)}, & \alpha=2\end{cases}$$

$$g_\beta=\begin{cases}E, & \beta=1\\ C_2^{(1)}, & \beta=2\end{cases}$$

利用元素乘法可得到 $h_i^{(\alpha)}(g)$，把计算结果列于下表中，其中：

$$
\begin{aligned}
h_1^{(1)}(g) &= E \cdot g \cdot E = g \in T \\
h_2^{(1)}(g) &= E \cdot g \cdot C_2^{(1)} = g \cdot C_2^{(1)} \in C_2^{(1)}T \\
h_1^{(2)} &= C_2^{(1)} \cdot g \cdot E = C_2^{(1)} \cdot g \in C_2^{(1)}T \\
h_2^{(2)} &= C_1^{(1)} \cdot g \cdot C_1^{(1)} \in T
\end{aligned}
$$

g	E	$C_4^{(1)2}$	$C_4^{(2)2}$	$C_4^{(3)2}$	$C_3^{(1)}$	$C_3^{(2)}$	$C_3^{(3)}$	$C_3^{(4)}$	$C_3^{(1)2}$	$C_3^{(2)2}$	$C_3^{(3)2}$	$C_3^{(4)2}$
$h_1^{(1)}(g)$	E	$C_4^{(1)2}$	$C_4^{(2)2}$	$C_4^{(3)2}$	$C_3^{(1)}$	$C_3^{(2)}$	$C_3^{(3)}$	$C_3^{(4)}$	$C_3^{(1)2}$	$C_3^{(2)2}$	$C_3^{(3)2}$	$C_3^{(4)2}$
g	$C_2^{(1)}$	$C_2^{(2)}$	$C_2^{(3)}$	$C_2^{(4)}$	$C_2^{(5)}$	$C_2^{(6)}$	$C_4^{(1)}$	$C_4^{(2)}$	$C_4^{(3)}$	$C_4^{(1)3}$	$C_4^{(2)3}$	$C_4^{(3)3}$
$h_2^{(1)}(g)$	E	$C_4^{(3)2}$	$C_3^{(4)2}$	$C_3^{(2)2}$	$C_3^{(2)}$	$C_3^{(4)}$	$C_3^{(i)2}$	$C_3^{(1)}$	$C_4^{(2)2}$	$C_3^{(3)2}$	$C_3^{(3)}$	$C_4^{(1)2}$

g	$C_2^{(1)}$	$C_2^{(2)}$	$C_2^{(3)}$	$C_2^{(4)}$	$C_2^{(5)}$	$C_2^{(6)}$	$C_4^{(1)}$	$C_4^{(2)}$	$C_4^{(3)}$	$C_4^{(1)3}$	$C_4^{(2)3}$	$C_4^{(3)3}$
$h_1^{(2)}(g)$	E	$C_4^{(3)2}$	$C_3^{(4)}$	$C_3^{(2)}$	$C_3^{(2)2}$	$C_3^{(4)2}$	$C_3^{(3)}$	$C_3^{(3)2}$	$C_4^{(1)2}$	$C_3^{(1)}$	$C_3^{(1)2}$	$C_4^{(4)2}$
g	E	$C_4^{(1)2}$	$C_4^{(2)2}$	$C_4^{(3)2}$	$C_3^{(1)}$	$C_3^{(2)}$	$C_3^{(3)}$	$C_3^{(4)}$	$C_3^{(1)2}$	$C_3^{(2)2}$	$C_3^{(3)2}$	$C_3^{(4)2}$
$h_2^{(2)}(g)$	E	$C_4^{(2)2}$	$C_4^{(1)2}$	$C_4^{(3)2}$	$C_3^{(3)2}$	$C_3^{(2)2}$	$C_3^{(1)2}$	$C_3^{(4)2}$	$C_3^{(3)}$	$C_3^{(2)}$	$C_3^{(1)}$	$C_3^{(4)}$

1. 由 T 群不可约表示 A 诱导 O 群的表示

T 群不可约表示 A，基矢为 $x^2+y^2+z^2$，它所诱导出的 O 群的表示 $D_\uparrow^O$ 为

$$
D_A^\uparrow(t_i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad t_i \in T
$$

$$
D_A^\uparrow(o_i) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad o_i \in O
$$

这是一个可约表示，通过矩阵

$$
A = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad A^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}
$$

可把它们约化为

$$
AD_\uparrow^O(t_i)A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad AD_\uparrow^O(t_i)A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
$$

因而它是 O 群不可约表示 A_1 和 A_2 的直和，即

$$
D_\uparrow^O = A_1 \oplus A_2
$$

2. 由 T 群不可约表示 B_1 诱导的 O 群二维表示

T 群一维表示 B_1 可诱导出 O 群二维诱导表示，它的表示矩阵为

$$
D^{(B_1 \to E)}(g) = \begin{pmatrix} G_{11}^d h_1^{(1)}(g) & G_{12}^d h_2^{(1)}(g) \\ G_{21}^d h_1^{(2)}(g) & G_{22}^d h_2^{(2)}(g) \end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{cases} \begin{pmatrix} h_1^{(1)}(g) & 0 \\ 0 & h_2^{(2)}(g) \end{pmatrix}, & g \in T \\[2ex] \begin{pmatrix} 0 & h_2^{(1)}(g) \\ h_1^{(2)}(g) & 0 \end{pmatrix}, & g \in C_2^{(1)}T \end{cases}
$$

利用同样的方法可由 T 群不可约表示 B_1 出发，得到

$$D^{(B_1\to E)}(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad D^{(B_1\to E)}(C_4^{(i)2})=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$D^{(B_1\to E)}(C_3^{(i)})=\begin{pmatrix}\varepsilon&0\\0&\varepsilon^2\end{pmatrix},\quad D^{(B_1\to E)}(C_3^{(i)2})=\begin{pmatrix}\varepsilon^2&0\\0&\varepsilon\end{pmatrix}$$

$$D^{(B_1\to E)}(C_2^{(1)})=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad D^{(B_1\to E)}(C_2^{(2)})=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(B_1\to E)}(C_2^{(3)})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon^2\\\varepsilon&0\end{pmatrix},\quad D^{(B_1\to E)}(C_2^{(4)})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon^2\\\varepsilon&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(B_1\to E)}(C_2^{(5)})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon\\\varepsilon^2&0\end{pmatrix},\quad D^{(B_1\to E)}(C_2^{(6)})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon\\\varepsilon^2&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(B_1\to E)}(C_4^{(1)})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon^2\\\varepsilon&0\end{pmatrix},\quad D^{(B_1\to E)}(C_4^{(2)})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon\\\varepsilon^2&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(B_1\to E)}(C_4^{(3)})=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad D^{(B_1\to E)}(C_4^{(1)3})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon^2\\\varepsilon&0\end{pmatrix}$$

$$D^{(B_1\to E)}(C_4^{(2)3})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon\\\varepsilon^2&0\end{pmatrix},\quad D^{(B_1\to E)}(C_4^{(3)2})=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

特征标为

$$\chi^{(E)}(E)=2,\quad \chi^{(E)}(C_4^{(i)2})=2,\quad \chi^{(E)}(C_3^{(i)})=\chi^{(E)}(C_3^{(i)2})=-1$$

$$\chi^{(E)}(g)=0,\quad g\in C_2^{(1)}T$$

因而与前面得到的二维表示为等价表示.

3. *由 T 群三维表示 $D^{(T)}$ 诱导出的 O 群六维表示*

由 T 群三维表示 $D^{(T)}$ 可诱导出 O 群的六维表示记为 $D^{(K)}$，它的表示矩阵为

$$D^{(T\to K)}(g)=\begin{cases}\begin{pmatrix}D^{(T)}(h_1^{(1)}(g))&0\\0&D^{(T)}(h_2^{(2)}(g))\end{pmatrix}, & g\in T\\[2ex]\begin{pmatrix}0&D^{(T)}(h_2^{(1)}(g))\\D^{(T)}(h_1^{(2)}(g))&0\end{pmatrix}, & g\in C_2^{(1)}T\end{cases}$$

由 T 群不可约表示 $D^{(T)}$ 的特征标容易得到表示 $D^{(T\to K)}$ 的特征标，即

$$\chi^{(T\to K)}(E)=6,\ \chi^{(T\to K)}(C_4^{(i)2})=-2,$$

$$\chi^{(T\to K)}(g)=0,\ g=C_3^{(i)},\ C_3^{(i)2},\ g\in C_2^{(1)}T$$

由此得到这个表示是可约表示，因为

$$(\chi^{(T\to K)},\chi^{(T\to K)})=\frac{1}{24}(36+3\times4)=2$$

由不可约表示在某可约表示中出现的重复数公式(1.11.10)可得到表示 $D^{(T\to K)}$ 中包括 O 群不可约表示 T_1 的重复数为

$$a_1=(\chi^{(T\to K)},\chi^{(T_1)})=\frac{1}{24}\sum_{g\in O}\chi^{(T-K)}(g)^*,\chi^{T_1}(g)=1$$

包括 T_2 不可约表示的重复数为

$$a_2 = (\chi^{(T\to K)}, \chi^{(T_2)}) = \frac{1}{24}\sum_{g\in O}\chi^{(T-K)}(g)^*, \chi^{T_2}(g) = 1$$

因而对表示 $D^{(T\to K)}$ 进行约化可得到 O 群的不可约表示 T_1 和 T_2.

T 群不可约表示 T 诱导出 O 群可约表示 $D^{(T\to K)}$，其中 O 群不可约表示 T_1 的重复度为 1，容易看到由 O 群不可约表示 T_1 分导出 T 群表示，即 $D^{T_1}\downarrow_T$，$D^{T_1}\downarrow_T$ 中也只包括 T 群的三维表示一次，即 $D^{T_1}\downarrow_T$ 中不可约表示 T 的重复度也是 1，这正是诱导表示中的 Frobenius 倒易定理所告诉我们的.

以上讨论的第一类点群的不可约表示的基矢都可正交归一化，把它们变换为酉表示.

3.5 第二类点群的不可约表示

第二类点群可分为两种，即直积群，如 $O_h = O\otimes I$；和与第一类点群同构的第二类点群，如 T_d 群同构于 O 群. 下面分别讨论它们的不可约表示.

3.5.1 第二类点群中直积群的不可约表示

1. 直积群 $G\otimes I$ 的不可约表示

在 1.12 节中讨论了直积群不可约表示的构成. 设群 $G = H\otimes F$，$H = \{h_1, h_2, \cdots, h_n\}$，$F = \{f_1, f_2, \cdots, f_n\}$，直积群 $G = \{g_{ij}, i = 1, 2, \cdots, n, j = 1, 2, \cdots, m\}$，而且 $g_{ij} = h_i f_j$. 如果 $G^{(H)}$，$G^{(F)}$ 分别为群 H 和 F 的不可约表示，则直积群 G 的不可约表示为

$$G(g_{ij}) = G^{(H)}(h_i)\otimes G^{(F)}(f_j)$$

矩阵元为

$$G(g_{ij})_{\alpha\beta,\gamma\sigma} = G^{(H)}(h_i)_{\alpha,\gamma}G^{(F)}(f_j)_{\beta,\sigma}$$

利用这一结果，可以得到第二类点群中直积群的不可约表示.

因此第二类点群中的直积群

$$G = H\otimes I$$

其中 H 为第一类点群. 直积群的不可约表示为 $G^{\mu\otimes\nu} = H^{(\mu)}\otimes I^{(\nu)}$，第一类点群 H 的不可约表示 $H^{(\nu)}$ 已经知道. I 为空间反演群 $I = \{E, i\}$，它的不可约表示为

I	E	i
A_g	1	1
A_u	1	-1

因而第二类点群的不可约表示为

$$G_g^{(k)}(g_{ij}) = \begin{cases} G_g^{(k)}(h_iE) = G^{(k_g)}(h_i) = H^{(k)}(h_i)\otimes A_g(E) = H^{(k)}(h_i) \\ G_g^{(k)}(h_ii) = G_g^{(k)}(ih_i) = H^{(k)}(h_i)\otimes A_g(i) = H^{(k)}(h_i) \end{cases}$$

$$G_u^{(k)}(g_{ij}) = \begin{cases} G_u^{(k)}(h_iE) = G_u^{(k)}(h_i) = H^{(k)}\otimes A_u(E) = H^{(k)}(h_i) \\ G_u^{(k)}(h_ii) = G_u^{(k)}(ih_i) = H^{k}(h_i)\otimes A_u(i) = -H^{(k)}(h_i) \end{cases}$$

下面作为例子列出了由直积构成的第二类点群 O_h 群的特征标表：

$O_h = O\otimes I$	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2=C_4^{(i)2}$	I	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
E_g	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
T_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
T_{2g}	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
E_u	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
T_{2u}	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1

由于 O_h 群的阶为 O 群的 2 倍，因而不可约表示增加为 O 群不可约表示的 2 倍. 不可约表示 K_g 一般称为对称表示，K_u 称反对称表示. 表中以 I 为分界线，左上角即为原 O 群的特征标，左下角也是 O 群的特征标. 右上角为元素 Ih_i 的对称表示的特征标，右下角为 Ih_i 的反对称表示的特征标，它们的数值都是 O 群相应特征标的负值.

2. *直积群 $I\otimes C_s$ 的不可约表示*

在第二类点群中

$$C_{(2m+1)h} = C_{2m+1}\otimes C_s,\ D_{2md} = D_{2m}\otimes C_s, D_{(2m+1)h} = D_{2m+1}\otimes C_s$$

它们的不可约表示也可由直积表示构成. $C_s = \{E, \sigma\}$，不可约表示为

C_s	E	σ
A'	1	1
A''	1	-1

于是

$$G^{(k')}(h_if_i) = H^{(k)}(h_i)\otimes A'(f_i)$$
$$= \begin{cases} G^{(k')}(h_iE) = G^{(k')}(h_i) = H^{(k)}(h_i) \\ G^{(k')}(h_i\sigma) = H^{(k)}(h_i) \end{cases}$$

$$G^{(k'')}(h_if_i) = H^{(k)}(h_i)\otimes A''(f_i)$$
$$= \begin{cases} G^{(k'')}(h_iE) = G^{(k')}(h_i) = H^{(k)}(h_i) \\ G^{(k'')}(h_i\sigma) = -H^{(k)}(h_i) \end{cases}$$

下表为 D_{5h} 群的特征标表的例子：

D_{5h}	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	σ_h	$2S_5$	$2S_5^3$	$5\sigma_v$
A_1'	1	1	1	1	1	1	1	1
A_2'	1	1	1	-1	1	1	1	-1
E_1'	2	$2\cos\frac{2\pi}{5}$	$2\cos\frac{4\pi}{5}$	0	2	$2\cos\frac{2\pi}{5}$	$2\cos\frac{4\pi}{5}$	0
E_2'	2	$2\cos\frac{4\pi}{5}$	$2\cos\frac{2\pi}{5}$	0	2	$2\cos\frac{4\pi}{5}$	$2\cos\frac{2\pi}{5}$	0
A_1''	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
A_2''	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
E_1''	2	$2\cos\frac{2\pi}{5}$	$2\cos\frac{4\pi}{5}$	0	-2	$-2\cos\frac{2\pi}{5}$	$-2\cos\frac{4\pi}{5}$	0
E_2''	1	$2\cos\frac{4\pi}{5}$	$2\cos\frac{2\pi}{5}$	0	-2	$-2\cos\frac{4\pi}{5}$	$-2\cos\frac{2\pi}{5}$	0

$\varepsilon = e^{i\frac{2\pi}{5}}$

3.5.2 与第一类点群同构的第二类点群的不可约表示

如果阶为 n 的第一类点群 $H=K\cup K'$，K 为 H 的阶为$\frac{n}{2}$的不变子群，K'为子群 K 的陪集，相应的与之同构的第二类点群为 $H^+=K\cup\{iK'\}$，则 H^+ 与 H 的不可约表示有相似矩阵，因而有相同的特征标表.

比如 T_d 群，同构于 O 群，$O=T\cup C_2^{(1)}T$，则 $T_d=T\cup\{IC_2^{(1)}T\}$. 因而 T_d 群与 O 群有相同的特征标表. 下面是由 O 群特征标给出 T_d 群的特征标表：

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
T_1	3	0	-1	-1	1
T_2	3	0	-1	1	-1

$$iC_2^{(1)}T=\{6\sigma_d,\ 6S_4\}$$

如果把 $6\sigma_d\to 6C_2^{(i)}$，$6S_4\to 6C_4$ 则变为 O 群的特征标表.

下面作为例子讨论 C_{2mv}群的不可约表示.

(2.2.4)节已给出了 C_{2mv}群的结构，它与 D_{2m}群同构，$\mathscr{C}_{2m}$群为它们的不变子群，它的结构为

$$\mathscr{C}_{2m}\cup\{iC_2^{(k)},\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ 2m\}=\mathscr{C}_{2m}\cup\{\sigma_v^{(k)},\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ 2m\}$$

D_{2m}群的结构为

$$\mathscr{C}_{2m}\cup\{C_2^{(k)},\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ 2m\}$$

因而可由 $\mathscr{C}_{2m}$群的不可约表示诱导出 C_{2mv}群的不可约表示.

$\mathscr{C}_{2mv}$群对子群 $\mathscr{C}_{2m}$的基础表示为

$$D_{C_{2m}}^{(d)}(C_{2m}^{k})=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad D_{C_{2m}}^{(d)}(\sigma_{v}^{(k)})=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

$\mathscr{C}_{2m}$群的不可约表示为

$\mathscr{C}_{2m}$	C_{2m}^{k}
A	1
B	$(-1)^{k}$
$E_l\begin{Bmatrix}l\\2m-l\end{Bmatrix}$	$\begin{cases}\varepsilon^{l}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi kl/m}\\\varepsilon^{*l}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi kl/m}\end{cases}$

$l=1,2,\cdots,m-1$

不可约表示 E_l 代表 $l=p$ 与 $l=2m-p$ 两个一维表示的直和.

因而由 $\mathscr{C}_{2m}$群不可约表示 A 诱导出的 C_{2mv}群二维表示为

$$D_{A}^{\uparrow}(C_{2m}^{k})=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad D_{A}^{\uparrow}(\sigma_{v}^{(k)})=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

这是一个二维可约表示，它可约化为两个一维不可约表示的直和 $A_1\oplus A_2$：

C_{2mv}	e	C_{2m}^{k}	$\sigma_{v}^{(k)}$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1

由 $\mathscr{C}_{2m}$群不可约表示 B 诱导出的 C_{2mv}群的表示为

$$D_{B}^{\uparrow}(C_{2m}^{k})=(-1)^{k}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$D_{B}^{\uparrow}(\sigma_{v}^{(k)})=(-1)^{k-1}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}=\begin{cases}-\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, & k\text{ 为偶},\ \sigma_{d}^{(p)}\\ \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, & k\text{ 为奇},\ \sigma_{v}^{(p)}\end{cases}$$

也是一个二维可约表示，容易看到当 n 为偶数时，它们给出两个一维表示，记为 B_1，B_2，而当 n 为奇数时，它们与 A_1 和 A_2 为等价表示. 对于 n 为偶数的情况，这两个二维不可约表示为

C_{2mv}	e	C_{2m}^{k}	$\sigma_{d}^{(p)}$	$\sigma_{v}^{(p)}$
B_1	1	$(-1)^{k}$	-1	1
B_2	1	$(-1)^{k}$	1	-1

由不可约表示 l 诱导出的二维表示为

$$D_{l}^{\uparrow}(C_{2m}^{k})=\varepsilon_{l}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad D_{l}^{\uparrow}(\sigma_{v}^{(k)})=\varepsilon^{l}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

这是不可约表示，记为 E_l，这样便得到了 C_{mv}群的全部不可约表示.

下面根据上述结果对于 $n=2m$ 和 $n=2m+1$ 两种情况给出它们的特征标表.

当 $n=2m$ 时，C_{2mv}群包括 $m+3$ 个类，即

$$\{e\}$$
$$\{C_{2m}^{k},\quad C_{2m}^{2m-k}\},\quad k=1,2,\cdots,m-1$$
$$\{C_{2m}^{m}=C_{2}\}$$
$$\{\sigma_{d}^{(p)},\quad p=1,3,5,\cdots,2m-1\}$$
$$\{\sigma_{v}^{(p)},\quad p=2,4,6,\cdots,2m\}$$

它的特征标为

C_{2mv}	e	C_2	$\{C_{2m}^{k},C_{2m}^{2m-k}\}$	$\{\sigma_d^p\}$	$\{\sigma_v^{(p)}\}$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	$(-1)^m$	$(-1)^k$	-1	1
B_2	1	$(-1)^m$	$(-1)^k$	1	-1
E_l	2	$2\cos(l\pi)=2(-1)^l$	$2\cos(\frac{\pi kl}{m})$	0	0

$l=1,2,\cdots,m-1$

当 $n=2m+1$ 时，$C_{(2m+1)v}$的类为

$$\{e\}$$
$$\{C_{2m+1}^{k}\ C_{2m+1}^{2m+1-k}\},\quad k=1,2,\cdots,2m+1$$
$$\{\sigma_{v}^{(k)},\quad k=1,2,\cdots,2m+1\}$$

它的特征标为

$C_{(2m+1)v}$	e	$\{C_{2(m+1)}^{k}\ C_{2(2m+1)}^{2m+1-k}\}$	$\{\sigma_v^{(k)}\}$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E_l	2	$2\cos(k\frac{2\pi l}{2m+1})$	0

$l=1,2,\cdots,2m+1$

3.6 线性分子对称群的不可约表示

2.6 节所讨论的 C_{nv}群，D_{nh}群，当 $n\to\infty$ 时，得到连续群 $C_{\infty v}$，当 $n\to\infty$ 时，而得到 $D_{\infty h}$，它们是描述线性分子所使用的对称群，它们的不可约表示可由相应点群 C_{nv}和 D_{nh}的不可约表示推广而得到.

3.6.1 直积群 $D_{\infty h}$的不可约表示

这些不可约表示标记为 Γ_g 或 Γ_u，Γ 为 D_{∞}群的不可约表示，g 或 u 为 I 群的对称表示和反对称表示，因而

$$D_{\infty h}^{(\Gamma_\alpha)}(d) = D_\infty^{(\Gamma)}(E) \otimes A_{(\alpha)}(d) = D_\infty^{(\Gamma)}(d), \quad d \in D_\infty, \alpha = g \text{ 或 } u$$

$$D_{\infty h}^{(\Gamma_\alpha)}(id) = D_\infty^{(\Gamma)}(d) \otimes A_{(\alpha)}(i) = \begin{cases} D_\infty^{(\Gamma)}(d), & \alpha = g \\ -D_\infty^{(\Gamma)}(d), & \alpha = u \end{cases} \quad (d \in D_\infty)$$

在(3.3.2)节中，已给出 D_n 群的表示矩阵为

D_n	C_n^k	$C_2^{(k)}$
E_l	$\begin{pmatrix} \varepsilon^{kl} & 0 \\ 0 & \varepsilon^{*kl} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \varepsilon^{(k-1)l} \\ \varepsilon^{*(k-1)l} & 0 \end{pmatrix}$

按定义 n 为偶数，$l=0, 1, 2, \cdots, \frac{n}{2}$，因为 $n\to\infty$，$\frac{n}{2}\to\infty$，只存在 $l=0$ 得到的不可约表示 E_0 为可约表示，即

D_n	$C_n^{(k)}$	$C_2^{(k)}$
E_0	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

它是两个一维不可约表示的直和：

D_n	C_n^k	$C_2^{(k)}$
A_1	1	1
A_2	1	-1

当 $n\to\infty$ 时，转角$\frac{2\pi k}{n}=\Phi$，为连续值，因而 D_∞ 群的元素为 $C_\infty(\Phi)$，有无穷多个 C_2 轴，即∞C_2，$C_\infty(\Phi)$与 $C_\infty(-\Phi)$为一个共轭类，因而 D_∞ 群的不可约表示为

D_∞	E	$C_\infty(\Phi)$	∞C_2
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E_l	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \varepsilon^l & 0 \\ 0 & \varepsilon^{*l} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \varepsilon^l \\ \varepsilon^{*l} & 0 \end{pmatrix}$

$l=1, 2, \cdots, \infty$，　$\varepsilon=e^{i\Phi}$

特征标表为

$\chi(D_\infty)$	E	$C_\infty(\Phi)C_\infty(-\Phi)$	∞C_2
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E_l	2	$2\cos l\Phi$	0

因而对 $D_{\infty h}$群的不可约表示得到特征标表为

$D_{\infty h}$	E	$C_\infty(\alpha)$	…	C_2	I	$IC_\infty(\alpha)$	…	σ_v
$A_{1g}(\Sigma_g^+)$	1	1	…	1	1	1	…	1
$A_{2g}(\Sigma_g^-)$	1	1	…	-1	1	1	…	-1
$E_{1g}(\Pi_g)$	2	$2\cos\alpha$	…	0	2	$-2\cos\alpha$	…	0
$E_{2g}(\Delta_g)$	2	$2\cos\alpha$	…	0	2	$2\cos\alpha$	…	0
…	…	…	…	…	…	…	…	…
$A_{1u}(\Sigma_u^+)$	1	1	…	-1	-1	-1	…	1
$A_{2u}(\Sigma_u^-)$	1	1	…	1	-1	-1	…	-1
$E_{1u}(\Pi_u)$	2	$2\cos\alpha$	…	0	-2	$-2\cos\alpha$	…	0
$E_{2u}(\Delta_u)$	2	$2\cos2\alpha$	…	0	-2	$-2\cos2\alpha$	…	0
…	…	…	…	…	…	…	…	…

具有 $D_{\infty h}$群对称性的线性分子，轨道角动量的 z 分量(沿 C_n 轴方向)是守恒的，因而用 Σ 标记 $l_z=0$ 的分子轨道，用 Π 标记 $l_z=1$ 的分子轨道，用 Δ 标记 $l_z=2$ 的分子轨道，用 Φ 标记 $l_z=3$ 的分子轨道…；$l_z=0$ 的分子轨道又可分为两种，即在 σ_v 作用下是对称和反对称的，它们分别用 Σ^+ 和 Σ^- 标记. 在上面的特征表中，第一列的不可约表示也标出了不可约表示所属分子轨道的 l_z，即 Σ, Π, Δ 等等.

3.6.2　$C_{\infty v}$群的不可约表示

C_{nv}群与 D_{2n}群同构，当 $n\to\infty$ 时，C_{nv}群变为 $C_{\infty v}$群. 它的不可约表示可直接推广 C_{nv} 的不可约表示而得到. 下面列出了 $C_{\infty v}$群的特征标表：

$C_{\infty v}$	E	$C_\infty(\alpha)$	…	σ_v
$A_1(\Sigma^+)$	1	1	…	1
$A_2(\Sigma^-)$	1	1	…	-1
$E_1(\Pi)$	2	$\cos\alpha$	…	0
$E_2(\Delta)$	2	$\cos2\alpha$	…	0
$E_3(\Phi)$	2	$\cos3\alpha$	…	0
…	…	…	…	…

3.7　双值群 $SO(3)^*$，$O(3)^*$ 与 $SO(3)$ 群的双值表示

点群在物理学和化学中的应用，主要是利用它们来描述分子和晶体的对称性. 而这些体系都是由原子核和电子构成的. 这些粒子不仅在三维空间 R_3 中运动，而且还具有一定自旋. 自旋实质上是二维旋量空间即 $SU(2)$空间中的向量，为了描述电子运动不仅需要它们在 R_3 空间的对称性，还需要描述它们的自旋在旋空间的对称性. 为此需要讨论与 $SU(2)$群同构的 $SO(3)^*$群，及其双值表示. 为了讨论双值表示，首先讨论 $SO(3)$群与 $SU(2)$群间同态关系.

3.7.1　$SU(2)$群与 $SO(3)$群同态

$SO(3)$群是 $\mathbf{R}^3$ 空间中全部正交变换(实酉变换)所构成的群，这些变换可由 3×3 的

单模正交矩阵表示，它们是绕空间任意轴的转动.

$SO(3)$群的一般元素通常由利用(1.7.2)式给出的 Euler 角 $\alpha\beta\gamma$ 表示，即

$$R(\alpha,\beta,\gamma)$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\sin\alpha\sin\gamma & -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma-\cos\gamma\sin\alpha & \sin\beta\cos\alpha\\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma+\sin\gamma\cos\alpha & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma+\cos\alpha\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta\\ -\cos\gamma\sin\beta & \sin\gamma\sin\beta & \cos\beta\end{pmatrix} \quad (3.7.1)$$

它代表一个复合转动，即首先绕 z 轴转 α 角，然后绕经历 α 角转动后的 y' 轴转 β 角，最后绕经历 α,β 转动后的 z'' 轴转 γ 角. 转动角度 α,β,γ 的定义域为 $0\leqslant\alpha\leqslant2\pi$，$0\leqslant\beta\leqslant2\pi$，$0\leqslant\gamma\leqslant2\pi$. 因而 $SO(3)$群是三个连续变化的参数 α,β,γ 构成的群.

$SU(2)$群由二维空间全部单模酉矩阵构成的群，它们可一般地写为

$$U=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix},\quad a,b,c,d\ \text{任意复数}$$

单模条件为

$$\det U=ad-bc=1$$

酉性质为

$$\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}^{+}=\begin{pmatrix}a^* & c^*\\ b^* & d^*\end{pmatrix}$$

即

$$\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a^* & c^*\\ b^* & d^*\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}aa^*+bb^* & ac^*+bd^*\\ ca^*+db^* & cc^*+dd^*\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}a^* & c^*\\ b^* & d^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}aa^*+cc^* & ba^*+dc^*\\ ab^*+cd^* & bb^*+dd^*\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

由此得到任意二维酉矩阵中 4 个复数满足条件

$$\begin{aligned}ad-bc&=1, & aa^*+cc^*&=1\\ aa^*+bb^*&=1, & bb^*+dd^*&=1\\ cc^*+dd^*&=1, & ab^*+cd^*&=0\\ ac^*+bd^*&=0\end{aligned}$$

在约束方程 $aa^*+bb^*=1$，$aa^*+cc^*=1$，$cc^*+dd^*=1$，$bb^*+dd^*=1$ 中，只有两个是独立的，比如从 $aa^*+bb^*=1$，$cc^*+dd^*=1$ 可推出 $aa^*+bb^*+cc^*+dd^*=2$，即 $aa^*+cc^*=1$，$bb^*+dd^*=1$. 因而单模酉矩阵

$$U=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix} \quad (3.7.2)$$

所受约束为

$$ad-bc=1\quad ac^*+bd^*=0$$

$$aa^* + bb^* = 1 \quad ab^* + cd^* = 0$$
$$cc^* + dd^* = 1 \tag{3.7.3}$$

4 个复数包括 8 个实数，它们受 5 个方程的约束，因而单模酉矩阵只有三个实参数，即 $SU(2)$ 群为三参数的连续群. 一般可写为

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \tag{3.7.4}$$

它自然满足

$$\det U = aa^* + bb^* = 1$$
$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} = \tilde{U}^* = U^+ \tag{3.7.5}$$

由(3.7.5)式可求出单模酉矩阵(3.7.4)式中复数 a, b 具有形式

$$a = \cos\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha+\gamma)/2}, \quad b = -\sin\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha-\gamma)/2}$$

因而得到一般的单模酉矩阵为

$$U(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} \tag{3.7.6}$$

其中 α, β, γ 也是 Eler 角. 只是它们的定义域为 $0 \leqslant \alpha \leqslant 4\pi$, $0 \leqslant \beta \leqslant 4\pi$, $0 \leqslant \gamma \leqslant 4\pi$. 也就是说 $U(\alpha, \beta, \gamma)$ 的变化周期是 4π.

由 $SU(2)$ 群元素的表达式(3.7.6)和 $SO(3)$ 群元素的表达式(3.7.1)可看出 $SU(2)$ 群与 $SO(3)$ 群同态. 这种同态映射为

$$SU(2) \longrightarrow SO(3)$$
$$U(\alpha, \beta, \gamma) \longrightarrow R(\alpha, \beta, \gamma)$$

当 $\alpha = \beta = \gamma = 0$ 时,

$$U(0, 0, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = e \longrightarrow R(0, 0, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = e$$

然而，当 $\alpha = \beta = \gamma = 2\pi$ 时,

$$U(2\pi, 2\pi, 2\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \bar{e} \longrightarrow R(2\pi, 2\pi, 2\pi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = e$$

这说明 $SU(2)$ 群与 $SO(3)$ 群同态，并非同构. $SU(2)$ 群的两个元素对应于 $SO(3)$ 群的一个元素，即

$$\left.\begin{array}{l} U(\alpha, \beta, \gamma) \\ U(\alpha+2\pi, \beta+2\pi, \gamma+2\pi) = \bar{e}U(\alpha, \beta, \gamma) \end{array}\right\} \longrightarrow R(\alpha, \beta, \gamma)$$

同态核为$\{e, \bar{e}\}$.（在第十章中将从 Lie 群理论对 $SU(2)$ 和 $SO(3)$ 的同态问题给出更严格的论证).

3.7.2　双值群 $SO(3)^*$

如果矩阵 $\hat{G}(U)$是 $SU(2)$群的不可约表示，U 为 $SU(2)$的元素，U 为单模二维酉矩阵. 由于 $\bar{e}^2=e$，因而

$$\hat{G}(\bar{e}^2) = \hat{G}(\bar{e})^2 = \hat{G}(e) \tag{3.7.7}$$

由于 e 与 $\bar{e}$ 和所有单模二维酉矩阵交换，因而 $\bar{e}$ 的表示矩阵 $\hat{G}(\bar{e})$与所有表示矩阵 $\hat{G}(U)$都交换，即

$$\hat{G}(U) \cdot \hat{G}(\bar{e}) = \hat{G}(\bar{e}) \cdot \hat{G}(U)$$

根据第一章讨论的舒尔引理 $\hat{G}(\bar{e})$为常数矩阵，因此(3.7.7)式为

$$\hat{G}(\bar{e}) = \pm\hat{G}(e) \tag{3.7.8}$$

$\hat{G}(e)$为表示空间的单位矩阵. 由此得到 $SU(2)$群的不可约表示 $\hat{G}(U)$可分为两类，即

$$\hat{G}(\bar{e}U) = \hat{G}(\bar{e})\hat{G}(U) = \begin{cases} \hat{G}(e)\hat{G}(U) = \hat{G}(U) \\ -\hat{G}(e)\hat{G}(U) = -\hat{G}(U) \end{cases} \tag{3.7.9}$$

对于 $\hat{G}(\bar{e}U)=\hat{G}(U)$的不可约表示称为单值表示，$\hat{G}(\bar{e}U) = -\hat{G}(U)$的不可约表示称为双值表示.

$SU(2)$群的不可约表示以 j 为标记，即 $G^{(j)}(U)$它是一个$(2j+1)$维的矩阵，j 可取正整数和正的半整数. 当 j 为正整数时(记为 l)，为单值表示，即

$$G^{(l)}(\bar{e}U) = G^{(l)}(U), \quad l=0, 1, 2, 3\cdots$$

当 j 为半整数时，为双值表示，即

$$G^{(j)}(\bar{e}U) = -G^{(j)}(U), \quad j=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}\cdots$$

(详细证明见本书第十一章)

由于 $SU(2)$群与 $SO(3)$群同态，以 $D^{(j)}(R)$代表 $SO(3)$群的不可约表示，因而

$$G^{(l)}(U) = G^{(l)}(\bar{e}U) \rightarrow D^{(l)}(R)$$

$$\left.\begin{array}{l} G^{(j)}(U) \\ G^{(j)}(\bar{e}U) = -G^{(j)}(U) \end{array}\right\} \rightarrow D^{(j)}(R)$$

这说明 $G^{(l)}(U)$是 $SO(3)$群的表示，但 $G^{(j)}(U)$并不是 $SO(3)$群的表示. 因为当 j 为半整数时，$SO(3)$群的 $2j+1$ 维的单位矩阵同时对应于 $G^{(j)}(\alpha=0, \beta=0, \gamma=0)$的 $2j+1$ 维的单位矩阵和 $G^{(j)}(\bar{e})$的 $2j+1$ 维的单位矩阵的负值，对于表示这是不允许的，因为单位元素的表示矩阵一定是表示空间的单位矩阵.

为了克服由于 $SU(2)$群同态于 $SO(3)$而带来的 $SU(2)$群的双值不可约表示不构成 $SO(3)$群的不可约表示这一问题，把 $SO(3)$群推广为与 $SU(2)$群同构的双值三维旋转

群，记为 $SO(3)^*$. 在 $SO(3)^*$ 群中，绕轴转 2π，认为是一个新的变换，它不是单位元而记为 $\bar{e}$（为避免与空间反演混淆记为 $\bar{e}$，而不用 i），它与 $SO(3)$ 群中的全部元素都交换. 而且 $\bar{e}^2=e$.

因而 $SO(3)^*$ 中的全部元素为 $R(\alpha,\beta,\gamma)$ 和 $\bar{e}R(\alpha,\beta,\gamma)$. 这样 $SU(2)$ 群就与 $SO(3)^*$ 同构了，即

$$U(\alpha,\beta,\gamma)\to R(\alpha,\beta,\gamma)$$
$$\bar{e}U(\alpha,\beta,\gamma)\to\bar{e}R(\alpha,\beta,\gamma) \tag{3.7.10}$$

这样 $SU(2)$ 的所有不可约表示都与 $SO(3)^*$ 的不可约表示一一对应，即

$$G^{(j)}(U)\to D^{(j)}(R_u) \quad G^{(j)}(\bar{e}U)\to D^{(j)}(\bar{e}R) \tag{3.7.11}$$

$SO(3)^*$ 群中绕任意两个不同轴转相同角度的元素 $R_{lnm}(\alpha)$ 与 $R_{l'n'm'}(\alpha)$ 都是共轭元素，亦即空间所有通过坐标原点的转轴都是等价轴，因为对一定 $\boldsymbol{r}$，可通过转动变为 $\boldsymbol{r}'$，即

$$R(\alpha,\beta,\gamma)\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'$$

因而绕任何轴转相同角度的转动属于一个共轭类. 于是它的特征标为转动角度的函数，并且为

$$\chi^{(l)}(\alpha)=\frac{\sin(l+\frac{1}{2})\alpha}{\sin\frac{1}{2}\alpha} \tag{3.7.12}$$

推广到 $SO(3)^*$ 后，群元素 $\bar{e}R_{lmn}(\alpha)=R_{lmn}(\alpha+2\pi)$. 于是

$$\chi^{(j)}(\alpha)=\frac{\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)\alpha}{\sin\frac{\alpha}{2}}$$

$$\chi^{(j)}(\alpha+2\pi)=\frac{\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)(\alpha+2\pi)}{\sin\left(\frac{\alpha}{2}+\pi\right)}=\frac{(-1)^{2j+1}\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)\alpha}{\sin\frac{\alpha}{2}}$$
$$=(-1)^{2j}\chi^{(j)}(\alpha)\begin{cases}\chi^{(j)}(\alpha), & 当 j=l=1,2,3,\cdots\\ -\chi^{(j)}(\alpha), & 当 j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\cdots\end{cases} \tag{3.7.13}$$

这又一次说明 $SU(2)$ 群的单值表示（$l=1,2,3\cdots$）为 $SO(3)$ 群的不可约表示，而双值表示$\left(j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\cdots\right)$不构成 $SO(3)$ 群的表示. 因为同一个转动 $R_{lmn}(\alpha)=R_{lmn}(\alpha+2\pi)$ 有两个特征标 $\chi^{(j)}(\alpha)=-\chi^{(j)}(\alpha+2\pi)$，这是表示所不允许的. 然而对 $SO(3)^*$ 由于 $R_{lmn}(\alpha)$ 与 $R_{lmn}(\alpha+2\pi)$ 是两个变换，而且 $\chi^{(j)}(\bar{e})=-\chi^{(j)}(e)$，于是 $j=1,2,\cdots;j=\frac{1}{2}$，$\frac{3}{2}$，$\frac{5}{2}$，…都是 $SO(3)^*$ 群的表示.

3.8　双值点群及其双值表示

3.8.1　双值点群的结构以及共轭元素类

第一类点群为 $SO(3)$ 群的子群，第二类点群或者为第一类点群与空间反演群的直积，或者同构于第一类点群. 为了得到点群的双值表示，也常把第一类点群推广为 $SO(3)^*$ 群的子群，于是就得到了第一类双值点群，以及它的双值表示. 第二类双值点群仍然为第一类双值点群的直积群或与第一类双值点群同构. 下面首先讨论第一类双值点群及其双值表示.

如果第一类点群 G 的阶为 n，群元素为

$$G=\{e,\ g_2,\ g_3,\ \cdots,\ g_n\}$$

则相应的双值点群 G^* 的阶为 $2n$，它的元素为

$$G^*=\{e,\ g_2,\ g_3,\ \cdots,\ g_{n-1},\ \bar{e},\ \bar{e}\cdot g_2,\ \bar{e}\cdot g_3,\ \cdots,\ \bar{e}\cdot g_n\} \tag{3.8.1}$$

在点群 G 中，绕等价轴转相同角度的元素为一类，对于双向轴，C_n^k 与 C_n^{n-k} 属于同一类，所谓双向轴就是存在一个与它垂直的二重轴或存在法线与它垂直的反射面. 对于双值群类的划分要复杂一些.

双值点群本质上是 $SU(2)$ 群的子群，因而类的划分与 $SU(2)$ 群有关. 共轭元素的定义仍然为

$$g_i\cdot g\cdot g_i^{-1}=g'\text{则 } g'\simeq g$$

但是对双值群元素求逆的方法与单值群不同，比如 C_n^k 的逆为

$$[C_n^k]^{-1}=C_n^{2n-k}=\bar{e}C_n^{n-k} \tag{3.8.2}$$

因为 $C_n^n=\bar{e}$ 而不是 e. 由此可得到第一类双值群同一共轭类的划分原则为：(1)双向轴 C_n^k 与 $\bar{e}C_n^{n-k}$ 为一类(即 C_n^k, C_n^{2n-k} 为一类，而 C_n^k 与 C_n^{k-n} 并非一类)；(2)垂直于 C_n 轴的 n 个二重轴 $C_2^{(k)}$，当 $n=$奇数时，$\{C_2^{(k)}\quad k=1,\ 2,\ \cdots,\ n\}$ 和 $\{\bar{e}C_2^{(k)}\ (k=1,\ 2,\ \cdots,\ n)\}$ 各自为一类；当 n 为偶数时，$\{C_2^{(k)},\ \bar{e}C_2^{(k)}\quad k=1,3,\ \cdots,\ n-1)\}$，$\{C_2^{(k)},\ \bar{e}C_2^k\quad k=2,\ 4,\ \cdots,\ n)\}$ 各为一类.

3.8.2　双值点群 $\mathscr{C}_n^*$ 及其不可约表示

$\mathscr{C}_n$ 群的阶为 n，它的元素为

$$\mathscr{C}_n=\left\{e,\ C_z\left(\frac{2\pi}{n}\right),\ C_z^2\left(\frac{2\pi}{n}\right),\ \cdots,\ C_z^{n-1}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\right\}$$

双值群 $\mathscr{C}_n^*$ 的阶为 $2n$，群元素为

$$\mathscr{C}_n^*=\left\{E,\ C_z\left(\frac{2\pi}{n}\right),\ C_z^2\left(\frac{2\pi}{n}\right),\ \cdots,\ C_z^{n-1}\left(\frac{2\pi}{n}\right),\right.$$

$$\left.\bar{e},\ \bar{e}C_z\left(\frac{2\pi}{n}\right),\ \bar{e}C_z^2\left(\frac{2\pi}{n}\right),\ \cdots,\ \bar{e}C_z^{n-1}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\right\}$$

它也是 Abel 群，而且是 $2n$ 阶的循环群，因而与 $\mathscr{C}_{2n}$群同构. $\mathscr{C}_n^*$ 群有 $2n$ 个一维不可约表

示. 由(3.3.2)式得到

$$\chi^{(p)}(C_n^k) = e^{i\frac{\pi}{n}pk} = \varepsilon^{\frac{p}{2}k}, \quad \varepsilon = e^{\frac{2\pi}{n}}, \quad p = 1, 2, \cdots, 2n$$

$$\chi^{(p)}(e) = 1, \chi^{(p)}(\bar{e}) = \varepsilon^{\frac{p}{2}n} = e^{i\pi p} = \begin{cases} 1, & \text{当} p = \text{偶数} \\ -1, & \text{当} p = \text{奇数} \end{cases}$$

$$\chi^{(p)}(\bar{e}C_n^k) = e^{i\pi p}\varepsilon^{\frac{p}{2}k} = \begin{cases} \varepsilon^{\frac{p}{2}k}, & \text{当} p = \text{偶数} \\ -\varepsilon^{\frac{p}{2}k}, & \text{当} p = \text{奇数} \end{cases} \tag{3.8.3}$$

由此看到 $p=2l(l=1, 2, \cdots, n)$ 的不可约表示是单值表示，它们就是 $\mathscr{C}_n$ 群的全部 n 个不可约表示，而 $p=2l+1(l=1, 2, \cdots, n-1)$ 的 n 个表示为 $\mathscr{C}_n^*$ 群的双值不可约表示，也就是一般所说的 $\mathscr{C}_n$ 群的双值表示.

注意到

$$\varepsilon^{*\frac{p}{2}k} = \varepsilon^{\frac{2n-p}{2}k} \tag{3.8.4}$$

因而第 p 个不可约表示与第 $(2n-p)$ 个不可约表示互为共轭表示. 因而通常把这两个不可约表示的直和记为一个二维表示 E_p，即

$$[E_p] = [p] \oplus [2n-p] \tag{3.8.5}$$

下面分别列出了 $\mathscr{C}_{2m}^*$ 和 $\mathscr{C}_{2m+1}^*$ 群的不可约表示的特征标表(在特征标表中用 (l) 表示 C_n 群的单值表示，用 $[p]$ 代表 $\mathscr{C}_n^*$ 群的不可约表示，$p=2l$ 为单值表示，$p=(2l+1)$ 为双值表示)：

	$\mathscr{C}_{2m}^*$	e	$\bar{e}$	C_{2m}^k	$\bar{e}C_{2m}^k$
单值表示	$(P=4m)$, A	1	1	1	1
	$(P=2m)$, B	1	1	$(-1)^k$	$(-1)^k$
	$E_2\begin{cases}p=2\\4m-2\end{cases}$	1	1	ε^k	ε^k
		1	1	ε^{*k}	ε^{*k}
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	$E_p\begin{cases}p=2l\\4m-p\end{cases}$ $(p\neq 2m)$	1	1	ε^{lk}	ε^{lk}
		1	1	ε^{*lk}	ε^{*lk}
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	$E_{[m]}\begin{cases}[m]\\4m-[m]\end{cases}$	1	1	$\varepsilon^{[m]k/2}$	$\varepsilon^{[m]k/2}$
		1	1	$\varepsilon^{*[m]k/2}$	$\varepsilon^{*[m]k/2}$
双值表示	$E_1\begin{cases}p=1\\p=4m-1\end{cases}$	1	1	$\varepsilon^{k/2}$	$-\varepsilon^{k/2}$
		1	-1	$\varepsilon^{*k/2}$	$-\varepsilon^{*k/2}$
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	$E_p\begin{cases}p=2l+1\\p=4m-p\end{cases}$	1	-1	$\varepsilon^{\frac{1}{2}(2l+1)k}$	$-\varepsilon^{\frac{1}{2}(2l+1)k}$
		1	-1	$\varepsilon^{\frac{1}{2}(2l+1)k}$	$-\varepsilon^{\frac{1}{2}(2l+1)k}$
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	$E_{[m]+1}\begin{cases}[m]+1\\4m-[m]-1\end{cases}$	1	-1	$\varepsilon^{([m]+1)k/2}$	$-\varepsilon^{([m]+1)k/2}$
		1	-1	$\varepsilon^{*([m]+1)k/2}$	$-\varepsilon^{*([m]+1)k/2}$

若 m 为偶数，$[m]=m$；若 m 为奇数，$[m]=m-1$，因而 $[m]$ 为偶数.

	$\mathscr{C}^*_{2m+1}$	e	$\bar{e}$	C^k_{2m+1}	$\bar{e}C^k_{2m+1}$
单值表示	$(P=4m+2)$, A	1	1	1	1
	$E_2\begin{cases}p=2\\4m+2-2\end{cases}$	1	1	ε^k	ε^k
		1	1	ε^{*k}	ε^{*k}
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	$E_{2l}\begin{cases}p=2l\\4m+2-2l\end{cases}$	1	1	ε^{lk}	ε^{lk}
		1	1	ε^{*kl}	ε^{*lk}
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	$E_{2m}\begin{cases}p=2m\\2m-2\end{cases}$	1	1	ε^{mk}	ε^{mk}
		1	1	ε^{*mk}	ε^{*mk}
双值表示	$p=2m+1$, A'	1	-1	$(-1)^k$	$-(-1)^k$
	$E_1\begin{cases}p=1\\p=2(2m+1)-1\end{cases}$	1	-1	$\varepsilon^{k/2}$	$-\varepsilon^{k/2}$
		1	-1	$\varepsilon^{*k/2}$	$-\varepsilon^{*k/2}$
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	$E_{2l+1}\begin{cases}p=2l+1\\2(2m+1)-2l-1\end{cases}$	1	-1	$\varepsilon^{\frac{1}{2}(2l+1)k}$	$-\varepsilon^{\frac{1}{2}(2l+1)k}$
		1	-1	$\varepsilon^{\frac{1}{2}(2l+1)k}$	$-\varepsilon^{\frac{1}{2}(2l+1)k}$
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	$E_{2m-1}\begin{cases}p=2m-1\\2m+3\end{cases}$	1	-1	$\varepsilon^{\frac{1}{2}(2m-1)k}$	$-\varepsilon^{\frac{1}{2}(2m-1)k}$
		1	-1	$\varepsilon^{*\frac{1}{2}(2m-1)k}$	$-\varepsilon^{*\frac{1}{2}(2m-1)k}$

3.8.3 双值群 D_n^* 及其不可约表示

D_n^* 的元素为

$$D_n^* = \{e,\ C_n^k,\ C_2^{(k)},\ \bar{e},\ \bar{e}C_n^k,\ \bar{e}C_2^{(k)}\}$$

它们的共轭类须分 $n=2m$ 和 $n=2m+1$ 两种情况讨论.

当 $n=2m$ 时，D_{2m}^*群有 $2m+3=n+3$ 个类，即

$$\{e\},\ \{\bar{e}\}$$
$$\{C_{2m}^k,\ \bar{e}C_{2m}^{(2m-k)}\},\quad k=1,2,\cdots,2m-1;$$
$$\{C_{2m}^m,\ \bar{e}C_{2m}^m\}$$
$$\{C_{2m}^{2m-k},\ \bar{e}C_{2m}^k\},\quad k=1,2,\cdots,m-1;$$
$$\{C_2^{(k)},\ \bar{e}C_2^{(k)}\};\quad k=2,4,\cdots,2m;$$
$$\{C_2^{(k')},\ \bar{e}C_2^{(k')}\},\quad k=1,3,5,\cdots,m-1.$$

当 $n=2m+1$ 时，D_{2m+1}^*有 $2m+4=n+3$ 个类. 它们为

$$\{e\},\ \{\bar{e}\},\ \{C_{2m+1}^k,\ \bar{e}C_{2m+1}^{(2m+1-k)}\}$$
$$\{C_{2m+1}^{2m+1-k},\ \bar{e}C_{2m+1}^k\},\quad k=1,2,\cdots,2m$$
$$\{C^{(k)}\},\quad k=1,2,\cdots,2m+1$$
$$\{\bar{e}C_2^{(k)}\},\quad k=1,2,\cdots,2m+1$$

由类的数目和群的阶的数目可得到 D_n^* 群有4个一维表示，$(n-1)$个二维表示，于是 $4\cdot 1+(n-1)\cdot 4=4n$，$4n$ 恰是 D_n^* 群的阶数. $\mathscr{C}_n^*$ 是 D_n^* 的不变子群，因而可由 $\mathscr{C}_n^*$ 的不可约表示诱导出 D_n^* 群的表示. $\mathscr{C}_n^*$ 群的阶为 $2n$，D_n^* 群的阶为 $4n$，因而 D_n^* 群对于子群 $\mathscr{C}_n^*$，可分为两个陪集，即

$$D_n^* = \begin{cases} \mathscr{C}_n^* \\ C_2^{(1)} \cdot \mathscr{C}_n^* \end{cases}$$

于是基础表示为

$$G^d(g) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & g \in \mathscr{C}_n^* \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & g \in C_2^{(1)'} \cdot \mathscr{C}_n^* \end{cases}$$

由 $\mathscr{C}_n^*$ 的一维表示诱导出的 D_n^* 群的二维表示为

$$D^{(p\to E_l)}(g)_{\alpha\beta} = G^d(g)_{\alpha\beta} \cdot h_\beta^{(\alpha)}(g) \tag{3.8.6}$$

其中 $h_\beta^{(\alpha)}(g)=g_\alpha^{-1}\cdot g\cdot g_\beta$. 可具体写为

$$h_1^{(1)}(g) = g \in \mathscr{C}_n^*$$
$$h_1^{(2)}(g) = C_2^{(1)} \cdot g \in \mathscr{C}_n^*$$
$$h_2^{(1)}(g) = E \cdot g \cdot C_2^{(1)} = g \cdot C_2^{(1)} \cdot \in \mathscr{C}_n^*$$
$$h_2^{(2)}(g) = C_2^{(1)} \cdot g \cdot C_2^{(1)} \in \mathscr{C}_n^*$$

计算出这些元素如下：

g	e	$\bar{e}$	C_n^k	$\bar{e}C_n^k$	g	$C_2^{(k)}$	$\bar{e}C_2^{(k)}$
$h_1^{(1)}(g)$	e	$\bar{e}$	C_n^k	$\bar{e}C_n^k$	$h_2^{(1)}(g)$	C_n^k	$\bar{e}C_n^k$

g	$C_2^{(k)}$	$\bar{e}C_2^{(k)}$	g	e	C_n^k	$\bar{e}$	$\bar{e}C_n^k$
$h_1^{(2)}(g)$	C_n^{-k}	$\bar{e}C_n^{-k}$	$h_2^{(2)}(g)$	e	C_n^{-k}	$\bar{e}$	$\bar{e}C_n^{-k}$

利用这些结果和 $\mathscr{C}_n^*$ 群的不可约表示由(3.8.6)式可得到 D_n^* 群的诱导表示.

1. D_{2m}^*群的不可约表示

由 $\mathscr{C}_{2m}^*$群的不可约表示 A 可得到 D_{2m}^*群的诱导表示：

$$D^{(A\to E_a)}(g) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & g \in \mathscr{C}_{2m}^* \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & g \in C_2^{(1)} \cdot \mathscr{C}_{2m}^* \end{cases}$$

它的特征标内积为

$$(\chi^{E_a}, \chi^{E_a}) = \frac{1}{8m}[4+4+2(2m-1)\cdot 4] = 2$$

这说明表示 $D^{(A\to E_a)}$是可约表示. 矩阵 $A=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$可约化这个可约表示为不可约表

示，即

$$AD^{(A\to E_a)}(g)A^{-1}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad g\in\mathscr{C}_{2m}^{*}$$

$$AD^{(A\to E_a)}(g)A^{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\quad g\in C_2^{(1)}\cdot\mathscr{C}_{2m}^{*}$$

这表明$[E_a]=[A_1]\oplus[A_2]$，表示 A_1 为恒等表示. 表示 A_2 对子群 $\mathscr{C}_{2m}^{*}$的元素为 1，对不属于 $\mathscr{C}_{2m}^{*}$的元素 $C_2^{(k)}$，$\bar{e}C_2^{(k)}$ 为 -1. $\mathscr{C}_{2m}^{*}$群的恒等表示给出了 D_{2m}^{*}的两个一维表示，它们都是单值表示.

由 $\mathscr{C}_{2m}^{*}$的不可约表示 B 诱导出的 D_{2m}^{*}的表示为

$$D^{(B\to E_b)}(E)=D^{(B\to E_b)}(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$D^{(B\to E_b)}(C_{2m}^{k})=D^{(B\to E_b)}(\bar{e}C_{2m}^{k})=\begin{pmatrix}(-1)^k&0\\0&(-1)^k\end{pmatrix}$$

$$D^{(B\to E_b)}(C_2^{(k)})=D^{(B\to E_b)}(\bar{e}C_2^{(k)})=\begin{pmatrix}0&(-1)^k\\(-1)^k&0\end{pmatrix}$$

由特征标内积同样可证明这也是一个可约表示，由矩阵 A 同样可约化为

$$AD^{(B\to E_b)}\begin{pmatrix}C_2^{(k)}\\\bar{e}C_2^{(k)}\end{pmatrix}A^{-1}=\begin{pmatrix}(-1)^k&0\\0&(-1)^{k+1}\end{pmatrix}$$

即

$$[E_b]=[B_1]\oplus[B_2]$$

不可约表示 B_1，B_2 对 $\mathscr{C}_{2m}^{*}$群的元素均为 1，而对 $C_2^{(k)}$ 和 $\bar{e}C_2^{(k)}$，B_1 为$(-1)^k$，B_2 为$(-1)^{k+1}$. 这两个一维表示也是单值表示.

由 $\mathscr{C}_{2m}^{*}$的不可约表示 $p=2l$ 得到的诱导表示为：

$$D^{(2l\to E_l)}(e)=D^{(2l\to E_l)}(\bar{e})=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$D^{(2l\to E_l)}(C_{2m}^{k})=D^{(2l\to E_l)}(\bar{e}C_{2m}^{k})=\begin{pmatrix}\varepsilon^{lk}&0\\0&\varepsilon^{lk}\end{pmatrix}$$

$$D^{(2l\to E_l)}(C_2^{(k)})=D^{(2l\to E_l)}(\bar{e}C_2^{(k)})=\begin{pmatrix}0&\varepsilon^{kl}\\\varepsilon^{kl}&0\end{pmatrix}$$

特征标的内积容易计算为 1，因而是不可约表示. $l=1, 2\cdots, m-1$，共$(m-1)$个二维表示，加上前面得到的 4 个一维表示，就是 D_{2m}群的全部不可约表示.

由 $\mathscr{C}_{2m}^{*}$的双值表示 $P=(2l+1)$诱导出的诱导表示为

$$D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(E) = -D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(\bar{e}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(C_{2m}^{k}) = -D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(\bar{e}C_{2m}^{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon^{(l+\frac{1}{2})k} & 0 \\ 0 & \varepsilon^{*(l+\frac{1}{2})k} \end{pmatrix}$$

$$D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(C_{2}^{(k)}) = -D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(\bar{e}C_{2}^{(k)}) = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon^{(l+\frac{1}{2})(k-1)} \\ \varepsilon^{*(l+\frac{1}{2})(k-1)} & 0 \end{pmatrix}$$

这里 $l=0, 1, 2, \cdots, m$, 为 m 个二维双值表示.

下面给出了 D_{2m}^{*} 的特征标表：

D_{2m}^{*}		e	$\bar{e}$	C_{2m}^{k} $\bar{e}C_{2m}^{2m-k}$	C_{2m}^{2m-k} $\bar{e}C_{2m}^{k}$	$C_2^{(2p)}$ $\bar{e}C_2^{(2p)}$	$C_2^{(2p+1)}$ $\bar{e}C_2^{(2p+1)}$
单值表示	A_1	1	1	1	1	1	1
	A_2	1	1	1	1	-1	-1
	B_1	1	1	$(-1)^k$	$(-1)^k$	1	-1
	B_2	1	1	$(-1)^k$	$(-1)^k$	-1	1
	E_l	2	2	$2\cos\left(\frac{\pi}{m}lk\right)$	$2\cos\left(\frac{\pi}{m}lk\right)$	0	0
双值表示	$E_{l+\frac{1}{2}}$	2	-2	$2\cos\left(\frac{\pi k}{m}(l+\frac{1}{2})\right)$	$-2\cos\left(\frac{\pi k}{m}(l+\frac{1}{2})\right)$	0	0

$l=1, 2, \cdots, m-1$

2. D_{2m+1}^{*}群的不可约表示

由 C_{2m+1}^{*}群的不可约表示 A 诱导出 D_{2m+1}^{*}群的两个一维表示，即

$$D^{(A\to E_a)}(g) = [A_1]\oplus[A_2]$$

A_1 为恒等表示，A_2 取值为 -1，为反对称表示.

由 $p=2l$ 的单值表示诱导出 D_{2m+1}^{*}群的单值表示，即

$$D^{(2l\to E_l)}(E) = D^{(2l\to E_l)}(\bar{e}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D^{(2l\to E_l)}(C_{2m+1}^{k}) = D^{(2l\to E_l)}(\bar{e}C_{2m+1}^{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon^{lk} & 0 \\ 0 & \varepsilon^{*lk} \end{pmatrix}$$

$$D^{(2l\to E_l)}(C_2^{(k)}) = D^{(2l\to E_l)}(\bar{e}C_2^{(k)}) = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon^{l(k-1)} \\ \varepsilon^{*l(k-)} & 0 \end{pmatrix}$$

由 $p=2m+1$ 的双值表示 A'，诱导出二维双值表示为

$$D^{(2m+1\to E_{m+\frac{1}{2}})}(E) = -D^{(2m+1\to E_{m+\frac{1}{2}})}(\bar{e}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D^{(2m+1\to E_{m+\frac{1}{2}})}(C_{2m+1}^{k}) = -D^{(2m+1\to E_{m+\frac{1}{2}})}(\bar{e}C_{2m+1}^{k}) = \begin{pmatrix} (-1)^k & 0 \\ 0 & (-1)^k \end{pmatrix}$$

$$D^{(2m+1\to E_{m+\frac{1}{2}})}(C_2^{(k)}) = -D^{(2m+1\to E_{m+\frac{1}{2}})}(\bar{e}C_2^{(k)}) = \begin{pmatrix} 0 & (-1)^{k+1} \\ (-1)^{k+1} & 0 \end{pmatrix}$$

它是可约表示，可约化为

$$AD^{(2m+1\to E_{m+\frac{1}{2}})}(C_2^{(k)})A^{-1} = \begin{pmatrix} (-1)^{k+1} & 0 \\ 0 & (-1)^{k+1} \end{pmatrix} = [B_1^{m+\frac{1}{2}}] \oplus [B_2^{m+\frac{1}{2}}]$$

由其它双值表示 $2l+1$ 诱导出的双值表示为

$$D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(e) = -D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(\bar{e}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(C_{2m+1}^k) = -D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(\bar{e}C_{2m+1}^k) = \begin{pmatrix} \varepsilon^{(l+\frac{1}{2})k} & 0 \\ 0 & \varepsilon^{*(l+\frac{1}{2})k} \end{pmatrix}$$

$$D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(C_2^{(k)}) = -D^{(2l+1\to E_{l+\frac{1}{2}})}(\bar{e}C_2^{(k)}) = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon^{(l+\frac{1}{2})k-1} \\ \varepsilon^{*(l+\frac{1}{2})k-1} & 0 \end{pmatrix}$$

D_{2m+1}^*群的特征标表如下：

D_{2m+1}^*		e	$\bar{e}$	C_{2m+1}^k $\bar{e}C_{2m+1}^{2m+1-k}$	C_{2m+1}^{2m+1-k} $\bar{e}C_{2m+1}^k$	$C_2^{(k)}$ $(k=1,\cdots,2m+1)$	$\bar{e}C_2^{(k)}$ $(k=1,\cdots,2m+1)$
单值表示	A_1	1	1	1	1	1	1
	A_2	1	1	1	1	-1	-1
	E_{2l}	2	2	$2\cos\frac{2\pi kl}{2m+1}$	$2\cos\frac{2\pi kl}{2m+1}$	0	0
双值表示	$B_1^{m+\frac{1}{2}}$	1	-1	$(-1)^k$	$(-1)^k$	$(-1)^k$	$(-1)^{k+1}$
	$B_2^{m+\frac{1}{2}}$	1	-1	$(-1)^k$	$(-1)^k$	$(-1)^{k+1}$	$(-1)^k$
	E_{2l+1}	2	-2	$2\cos\left(\frac{2\pi k}{2m+1}(l+\frac{1}{2})\right)$	$-2\cos\left(\frac{2\pi k}{2m+1}(l+\frac{1}{2})\right)$	0	0

$l=1, 2, \cdots, m-1$

3.8.4　双值点群 T^* 和 O^* 及其不可约表示

1. 双值群 T^* 及其不可约表示

T 群有 12 个元素，即

$$T = \{e,\ C_2^{(k)}\quad k=1, 2, 3;\ C_3^{(k)},\ C_3^{(k)2}\quad k=1, 2, 3, 4\}$$

双值群 T^* 有 24 个元素，它为

$$T^* = \{e,\ C_2^{(k)},\ k=1, 2, 3;\ C_3^{(k)},\ C_3^{(k)2},\ k=1, 2, 3, 4,$$
$$\bar{e},\ \bar{e}C_2^{(k)},\ \bar{e}C_3^{(k)},\ \bar{e}C_2^{(k)2}\}$$

它有七个类，即

$$\{e\},\quad \{\bar{e}\},\quad \{C_3^{(k)}, k=1, 2, 3, 4\},\quad \{C_3^{(k)2}, k=1, 2, 3, 4\},$$

$$\{\bar{e}C_3^k,\ k = 1, 2, 3, 4\},\quad \{\bar{e}C_3^{(k)^2},\ k = 1, 2, 3, 4\},$$
$$\{C_2^{(k)},\ \bar{e}C_2^{(k)},\ k = 1, 2, 3\}$$

因而存在 7 个不可约表示，其中 3 个一维表示，3 个二维表示，1 个三维表示. 3 个一维表示和 1 个三维表示是单值表示，3 个二维表示是双值表示. 下面列出 T^* 不可约表示的特征标表：

T^*	e	$\bar{e}$	$C_3^{(k)}$	$C_3^{(k)2}$	$\bar{e}C_3^{(k)}$	$\bar{e}C_3^{(k)2}$	$C_2^{(k)}$, $\bar{e}C_2^{(k)}$
A	1	1	1	1	1	1	
E	1	1	ε	ε^*	ε	ε^*	1
	1	1	ε^*	ε	ε^*	ε	1
T	3	3	0	0	0	0	-1
E'	2	-2	1	-1	-1	1	0
E''	2	-2	ε	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$	ε^2	0
E'''	2	-2	ε^2	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$	ε	0

$\varepsilon = e^{i\frac{2\pi}{3}}$

2. 双值群 O^* 及其不可约表示

这个群的阶为 48，分为 8 类，即

$$\{e\},\ \{\bar{e}\},$$
$$\{C_3^{(k)},\ \bar{e}C_3^{(k)^2},\quad k = 1, 2, 3, 4\},\quad \{C_3^{(k)^2},\ \bar{e}C_3^{(k)},\quad k = 1, 2, 3, 4\},$$
$$\{C_4^{(k)},\ \bar{e}C_3^{(4)^3},\ k = 1, 2, 3\},\quad \{C_4^{(k)^2},\ \bar{e}C_4^{(k)^2},\ k = 1, 2, 3\},$$
$$\{C_4^{(k)^3},\ \bar{e}C_4^{(k)},\ k = 1, 2, 3\},\quad \{C_2^{(k)},\ \bar{e}C_2^{(k)},\ k = 1, 2, 3, \cdots, 6\}$$

有 8 个不可约表示，其中 2 个一维表示，3 个二维表示，2 个三维表示，一个 4 维表示.

下面给出双值群 O^* 的特征标表.

$O*$		e	$\bar{e}$	$C_3^{(k)}$ $\bar{e}C_3^{(k)2}$	$C_3^{(k)2}$ $\bar{e}C_3^{(k)}$	$C_4^{(k)}$ $\bar{e}C_4^{(k)3}$	$C_4^{(k)2}$ $\bar{e}C_4^{(k)2}$	$C_4^{(k)3}$ $\bar{e}C_4^{(k)}$	$C_2^{(k)}$ $\bar{e}C_2^{(k)}$
单值表示	A_1	1	1	1	1	1	1	1	1
	A_2	1	1	1	1	-1	1	-1	-1
	E	2	2	-1	-1	0	2	0	0
	T_1	3	3	0	0	1	-1	1	-1
	T_2	3	3	0	0	-1	-1	-1	1
双值表示	Γ_6	2	-2	1	-1	$\sqrt{2}$	0	$-\sqrt{2}$	0
	Γ_7	2	-2	1	-1	$-\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	0
	Γ_8	4	-4	-1	1	0	0	0	0

3.8.5 第二类双值点群

对于具有 $D=G\cdot I$ 结构的第二类点群，相应的双值群为 $D^{*}=G^{*}\cdot I$. 因而 D^{*} 的不可约表示可由 G^{*} 的不可约表示与 I 的不可约表示的直积得到.

第二类点群 D 同构于第一类点群 G 时，$D=K\cup I\cdot K^{+}$，其中 K 为 G 的不变子群，K 的阶为 G 的阶的$\frac{1}{2}$. K^{+} 为 G 群对于子群 K 的陪集. 此时双值群 D^{*} 同构于 G^{*}，$D^{*}=K^{*}\cup I\cdot K^{*+}$，双值表示也可由 G^{*} 的双值表示得到.

3.9 点群的 Clebsch-Gordan 系数

3.9.1 点群不可约表示直积的分解与 Clebsch-Gordan 级数

点群 G 的两个不可约表示 Γ_1 与 Γ_2 的表示矩阵分别为 $D^{\Gamma_1}(g)$，$D^{\Gamma_2}(g)$，它们的维数为 m_1 和 m_2. 这两个不可约表示的直积为

$$D^{\Gamma_1}(g)\otimes D^{\Gamma_2}(g)=D^{\Gamma_1\times\Gamma_2}(g)$$

称表示 $D^{\Gamma_1\times\Gamma_2}(g)$ 为 Γ_1 与 Γ_2 的直积表示，它的矩阵元为

$$D^{\Gamma_1\times\Gamma_2}(g)_{ik,jl}=D^{\Gamma_1}(g)_{ij}D^{\Gamma_2}(g)_{kl} \tag{3.9.1}$$

直积表示$(\Gamma_1\times\Gamma_2)$的维数为 $m_1\times m_2$. 它的特征标$\chi^{(\Gamma_1\times\Gamma_2)}$为两个不可约表示的特征标之积，即

$$\chi^{(\Gamma_1\times\Gamma_2)}(g)=\chi^{(\Gamma_1)}(g)\chi^{(\Gamma_2)}(g) \tag{3.9.2}$$

如果不可约表示 Γ_1 与 Γ_2 的基矢为$\{\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)},\ \gamma_1=1,2,\cdots,m_1\}$和$\{\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)},\ \gamma_2=1,2,\cdots,m_2\}$，则直积表示的基矢为$\{\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}\}$.

点群是作用于空间 $\mathbf{R}^3$ 的线性变换群，因而群算子 $\hat{P}(g)$ 作用于空间函数 $f(\boldsymbol{r})$ 为

$$\hat{P}f(\boldsymbol{r})=f(g^{-1}\boldsymbol{r})$$

点群表示的基矢都是 $\boldsymbol{r}$ 的函数，因而容易得到

$$\hat{P}(g)[\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}(\boldsymbol{r})\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}(\boldsymbol{r})]=\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}(g^{-1}\boldsymbol{r})\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}(g^{-1}\boldsymbol{r})=\hat{P}(g)\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\hat{P}(g)\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}$$

由此得到

$$\begin{aligned}
&\hat{P}(g)[\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}(\boldsymbol{r})\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}(\boldsymbol{r})]\\
&=\hat{P}(g)\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\hat{P}(g)\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}\\
&=\sum_{\gamma_1'\gamma_2'}D^{(\Gamma_2)}(g)_{\gamma_1'\gamma_1}D^{(\Gamma_2)}(g)_{\gamma_2'\gamma_2}[\Psi_{\gamma_1'}^{(\Gamma_1)}(\boldsymbol{r})\Psi_{\gamma_2'}^{(\Gamma_2)}(\boldsymbol{r})]\\
&=\sum_{\gamma_1'\gamma_2'}D^{(\Gamma_1\times\Gamma_2)}(g)_{\gamma_1'\gamma_2',\gamma_1\gamma_2}[\Psi_{\gamma_1'}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2'}^{(\Gamma_2)}]
\end{aligned} \tag{3.9.3}$$

从而证明了函数集合$\{\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}(\boldsymbol{r})\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}(\boldsymbol{r})\}$确实是直积表示$(\Gamma_1\times\Gamma_2)$的基矢，表示矩阵为 $D^{(\Gamma_1)}(g)\times D^{(\Gamma_2)}(g)$.

即使$(\Gamma_1)(\Gamma_2)$都是不可约表示，直积表示$(\Gamma_1\times\Gamma_2)$一般也是可约表示. 它可约化

为一系列不可约表示的直和. 因而存在一个 $m_1 \times m_2$ 维的酉矩阵 U，在它的作用下，矩阵 $D^{(\Gamma_1\times\Gamma_2)}(g)$ 变为准对角矩阵，亦即

$$U^{-1}\cdot D^{(\Gamma_1\times\Gamma_2)}(g)\cdot U=\begin{pmatrix} D^{(\Gamma_i)}(g) & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & D^{(\Gamma_i)}(g) & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & D^{(\Gamma_j)}(g) & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & D^{(\Gamma_k)}(g) \end{pmatrix} \tag{3.9.4}$$

其中某些不可约表示(Γ_i)可能出现若干次. 这表明直积表示等价于一系列不可约表示的直和，因而可写为

$$D^{(\Gamma_1\times\Gamma_2)}(g)\simeq\sum_{\Gamma_i}\oplus a_{\Gamma_i}(\Gamma_1\Gamma_2)D^{(\Gamma)_i}(g) \tag{3.9.4'}$$

其中 $a_{\Gamma_i}(\Gamma_1\Gamma_2)$代表在直积表示$(\Gamma_1\times\Gamma_2)$中不可约表示 Γ_i 出现的次数，称为重复度. $a_{\Gamma_i}(\Gamma_1\Gamma_2)$由(1.11.8)式给出，为

$$a_{\Gamma_i}(\Gamma_1\Gamma_2)=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(\Gamma_i)*}\chi^{(\Gamma_1\times\Gamma_2)} \tag{3.9.5}$$

(3.9.4)和(3.9.4′)式称为 Clebsch-Gordan 级数(Clebsch-Gordan series)

3.9.2 点群的 Clebsch-Gordan 系数

直积表示$(\Gamma_1\times\Gamma_2)$可以约化为不可约表示(Γ_i)的直和(即 Clebsch-Gordan 级数)，这一事实说明直积表示的基矢$\{\Psi_{\gamma_1}^{\Gamma_1}\Psi_{\gamma_2}^{\Gamma_2}\}$可以通过线性组合变换成不可约表示$(\Gamma_i)$的基矢. 这种线性组合系数为$(\Gamma_1\Gamma_2\gamma_1\gamma_2|\Gamma\gamma)_i$，即

$$\Psi_\gamma^{(\Gamma)_i}(\Gamma_1\Gamma_2)=\sum_{\gamma_1\gamma_2}(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2\mid\Gamma\gamma)_i\Psi_{\gamma_1}^{\Gamma_1}\Psi_{\gamma_2}^{\Gamma_2} \tag{3.9.6}$$

函数集合$\{\Psi_\gamma^{(\Gamma_i)}(\Gamma_1\Gamma_2),\ \gamma=\gamma',\ \gamma'',\ \cdots\}$构成点群 G 的不可约表示 Γ_i 的基矢，即

$$\hat{P}(g)\Psi_\gamma^{(\Gamma)_i}(\Gamma_1\Gamma_2)_j=\sum_{\gamma'}D(g)_{\gamma'\gamma}\Psi_{\gamma'}^{(\Gamma)_i}(\Gamma_1\Gamma_2)$$

i 表示这个不可约表示(Γ)是在直积 $D^{(\Gamma_1)}\otimes D^{(\Gamma_2)}$分解中重复出现 $a_\Gamma(\Gamma_1\Gamma_2)$次的不可约表示 Γ 中的第 i 个，因而 $i=1,\ 2,\ \cdots,\ a_\Gamma(\Gamma_1\Gamma_2)$.

称(3.9.6)式给出的把直积表示基矢组合为不可约表示基矢的组合系数$(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2|\Gamma\gamma)_i$ 为点群 G 的 Clebsch-Gordan 系数，简写为 C-G 系数，也称为向量耦系数，经过它们的变换把直积表示的基矢组合为不可约表示的基矢. 如果不可约表示基矢$\{\Psi_{\gamma_1}^{\Gamma_1}\}$和$\{\Psi_{\gamma_2}^{\Gamma_2}\}$是正交归一化，则经过 C-G 系数组合成的不可约表示 Γ_i 的基矢也是正交归一化的，即

$$(\Psi_\gamma^{(\Gamma)_i}(\Gamma_1\Gamma_2),\ \Psi_{\gamma'}^{(\Gamma')_j}(\Gamma_1\Gamma_2))=\delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{ij}\delta_{\gamma\gamma'}.$$

全部 C-G 系数$(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2|\Gamma\gamma)_i$ 构成 $m_1\times m_2$ 维的矩阵，以 $\gamma_1\gamma_2$ 为矩阵的行指标，以 Γ，i，γ 为列指标，它们就是(3.9.4)式中矩阵 U 的矩阵元.

由(3.1.4)式容易得到 $\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}$ 与 $\Psi_{\gamma}^{(\Gamma_i)}$ 的内积为

$$
\begin{aligned}
(\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)},\ \Psi_{\gamma}^{(\Gamma)i}) &= \sum_{\gamma_1'\gamma_2'}(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1'\gamma_2' \mid \Gamma\gamma)_i(\Psi_{\gamma_1'}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2'}^{(\Gamma_2)},\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}) \\
&= \sum_{\gamma_1'\gamma_2'}(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1'\gamma_2' \mid \Gamma\gamma)_i\delta_{\gamma_1\gamma_1'}\delta_{\gamma_2\gamma_2'} \\
&= (\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2 \mid \Gamma\gamma)_i
\end{aligned}
\tag{3.9.7}
$$

取(3.9.6)式的逆变换，即

$$
\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)} = \sum_{i\Gamma\gamma}(\Gamma\gamma \mid \Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2)_i\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)i} \tag{3.9.8}
$$

$(\Gamma\gamma|\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2)_i$ 为$(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2|\Gamma\gamma)_i$ 的逆，同样可得到内积

$$
\begin{aligned}
(\Psi_{\gamma'}^{(\Gamma')j},\ \Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}) &= \sum_{i\Gamma\gamma}(\Gamma\gamma \mid \Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2)_i(\Psi_{\gamma'}^{(\Gamma')j},\ \Psi_{\gamma'}^{(\Gamma)i}) \\
&= \sum_{i\Gamma\gamma}(\Gamma\gamma \mid \Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2)_i\delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{ji}\delta_{\gamma\gamma'} \\
&= (\Gamma'\gamma' \mid \Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2)_j
\end{aligned}
\tag{3.9.9}
$$

按内积定义

$$
(\Psi_{\gamma'}^{(\Gamma')j},\ \Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}) = (\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)},\ \Psi_{\gamma'}^{(\Gamma')j})^*
$$

因而可得到$(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2|\Gamma\gamma)_i$ 与它的逆$(\Gamma\gamma|\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2)_i$ 间的关系为

$$
(\Gamma\gamma|\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2)_i = (\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2|\Gamma\gamma)_i^* \tag{3.9.10}
$$

(3.9.7)式和(3.9.9)式说明 C-G 系数与基矢的内积之间的关系.

由基矢的正交归一化性质可得到 C-G 系数的正交关系，即

$$
\begin{aligned}
(\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)i},\ \Psi_{\gamma'}^{(\Gamma')j}) &= \delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{ij} \\
&= \sum_{\gamma_1\gamma_1''}\sum_{\gamma_2\gamma_2''}(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1'\gamma_2' \mid \Gamma\gamma)_i^*(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1''\gamma''_2 \mid \Gamma'\gamma')_j \\
&\quad (\Psi_{\gamma_1'}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2'}^{(\Gamma_2)},\ \Psi_{\gamma_1''}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2''}^{(\Gamma_2)}) \\
&= \sum_{\gamma_1\gamma_1''}\sum_{\gamma_2\gamma_2''}(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1'\gamma_2' \mid \Gamma\gamma)_i^*(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1''\gamma_2'' \mid \Gamma'\gamma')_j\delta_{\gamma_1'\gamma_1''}\delta_{\gamma_2'\gamma_2''} \\
&= \sum_{\gamma_1'\gamma_2'}(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1'\gamma_2' \mid \Gamma\gamma)_i^*(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1'\gamma_2' \mid \Gamma'\gamma')_j
\end{aligned}
$$

即

$$
\sum_{\gamma_1\gamma_2}(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2 \mid \Gamma\gamma)_i^*(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2 \mid \Gamma'\gamma')_j = \delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{ij}\delta_{\gamma\gamma'} \tag{3.9.11}
$$

由内积

$$
(\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)},\ \Psi_{\gamma_1'}^{(\Gamma_1')}\Psi_{\gamma_2'}^{(\Gamma_2')}) = \delta_{\Gamma_1\Gamma_1'}\delta_{\Gamma_2\Gamma_2'}\delta_{\gamma_1\gamma_1'}\delta_{\gamma_2\gamma_2'}
$$

同样得到 C-G 系数的另一个正交关系，即

$$
\sum_{i\Gamma\gamma}(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2 \mid \Gamma\gamma)_i^*(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1'\gamma_2' \mid \Gamma\gamma)_i = \delta_{\gamma_1\gamma_1'}\delta_{\gamma_2\gamma_2'} \tag{3.9.12}
$$

(3.9.11)和(3.9.12)式恰好说明由 C-G 系数构成的矩阵为酉矩阵，这是 C-G 系数的两个重要性质.

C-G 系数除由(3.9.7)式和(3.9.9)式给出的与基矢的关系外，当然也与表示矩阵有关系，实际上 C-G 系数的数值就是由表示矩阵计算的，下面就来讨论这些问题.

用群算子 $\hat{P}(g)$ 作用于(3.9.6)式给出的基矢 $\Psi_{\gamma}^{\Gamma_i}(\Gamma_1\Gamma_2)$，得到

$$\begin{aligned}&\hat{P}(g)\Psi_{r_3}^{(\Gamma_3)i}(\Gamma_1\Gamma_2)\\&=\sum_{r_3'}D^{(\Gamma_3)}(g)_{r_3'r_3}\Psi_{r_3'}^{(\Gamma_3)i}(\Gamma_1\Gamma_2)\\&=\sum_{r_3'r_1'r_2'}(\Gamma_1\Gamma_2,\,r_1'r_2'\mid\Gamma_3r_3)_iD^{(\Gamma_3)*}(g)_{r_3'r_3}\psi_{r_1'}^{(\Gamma_1)}\psi_{r_2'}^{(\Gamma_2)}\end{aligned}\tag{3.9.13}$$

另一方面可得到

$$\begin{aligned}&\hat{P}(g)\Psi_{r_3}^{(\Gamma_3)i}(\Gamma_1\Gamma_2)\\&=\sum_{r_1r_2}(\Gamma_1\Gamma_2,\,r_1r_2\mid\Gamma_3r_3)_i\sum_{r_1'r_2'}D_{r_1'r_1}^{(\Gamma_1)}(g)D_{r_2'r_2}^{(\Gamma_2)}(g)\psi_{r_1'}^{(\Gamma_1)}\psi_{r_2'}^{(\Gamma_2)}\end{aligned}\tag{3.9.14}$$

比较(3.9.13)和(3.9.14)式得到

$$\begin{aligned}&\sum_{r'}(\Gamma_1\Gamma_2,\,r_1r_2\mid\Gamma_3r_3')_iD^{(\Gamma_3)}(g)_{r_3'r_3}\\&=\sum_{r_1r_2}(\Gamma_1\Gamma_2,\,r_1r_2\mid\Gamma_3r_3)_iD^{(\Gamma_1)}(g)_{r_1'r_1}D^{(\Gamma_2)}(g)_{r_2'r_2}\end{aligned}\tag{3.9.15}$$

利用 C-G 系数的正交性，在上式两端乘以$(\Gamma_1\Gamma_2,\,r_1'r_2'\mid\Gamma_3r_3)_i^*$，并对 Γ_3r_3i 求和，得到

$$\begin{aligned}&\sum_{\Gamma_3r_3r_3'i}(\Gamma_1\Gamma_2,\,r_1'r_2'\mid\Gamma_3r_3)_i^*(\Gamma_1\Gamma_2,\,r_1r_2\mid\Gamma_3r_3')_iD_{r_3'r_3}^{(\Gamma_3)}(g)\\&=D^{(\Gamma_1)}(g)_{r_1'r_1}D^{(\Gamma_2)}(g)_{r_2'r_2}\end{aligned}\tag{3.9.16}$$

利用表示矩阵的广义正交定理，把(3.9.16)式两端乘以$D^*(g)_{r_3'r_3}^{(\Gamma_3)}$对 g 求和，则得到

$$\begin{aligned}&\sum_i(\Gamma_1\Gamma_2,\,r_1'r_2'\mid\Gamma_3r_3')_i(\Gamma_1\Gamma_2,\,r_1r_2\mid\Gamma_3r_3)_i^*\\&=\frac{\lambda(\Gamma_3)}{n}\sum_{g\in G}D_{r'r_1}^{(\Gamma_1)}(g)D^{(\Gamma_2)}(g)_{r_2'r_2}D^{(\Gamma_3)*}(g)_{r_3'r_3}\end{aligned}\tag{3.9.17}$$

(3.9.17)式对研究点群 C-G 系数是非常重要的，它揭示了 C-G 系数与表示矩阵的关系. $\lambda(\Gamma_3)$为不可约表示 Γ_3 的维数.

上述关于 C-G 系数的定义不仅对点群适用，也适用于所有的群，只是对连续群(3.9.17)式须改为对群元素的积分.

如果群 G 不可约表示直积分解不存在重复出现问题，或者说 Clebsch-Gordan 级数中不包括脚标 i，即 $a_{\Gamma_i}(\Gamma_1\Gamma_2)=1$. 此时(3.9.17)式便可给出 C-G 系数的绝对值，因为在(3.9.17)式中取 $\gamma_1=\gamma_1'$，$\gamma_2=\gamma_2'$，$\gamma_3=\gamma_3'$ 可变为

$$\begin{aligned}&|(\Gamma_1\Gamma_2,\,\gamma_1\gamma_2\mid\Gamma_3\gamma_3)|^2\\&=\frac{\lambda(\Gamma_3)}{n}\sum_{g\in G}D^{(\Gamma_1)}(g)_{\gamma_1\gamma_1}D^{(\Gamma_2)}(g)_{\gamma_2\gamma_2}D^{(\Gamma_3)*}(g)_{\gamma_3\gamma_3}\end{aligned}\tag{3.9.18}$$

因而由(3.8.18)式确定了全部 C-G 系数的绝对值，然后再由基矢性质决定它们的相因子. 比如 $SO(3)$群全部不可约表示直积分解中都没有重复出现问题，C-G 系数的数值就可由与(3.9.18)式相似的，以群空间积分代替对群元素求和的公式来决定. 但是点群的直积分解中包括 $a_\Gamma(\Gamma_1\Gamma_2)\neq1$ 的重复出现问题，因而问题就更加复杂了.

3.9.3　点群 Clebsch-Gordan 系数的对称性与 V-系数

1. C-G 系数对 Γ_1 与 Γ_2 的交换对称性

由(3.9.17)式可看到 C-G 系数对交换 Γ_1, Γ_2 具有对称性，即

$$\sum_i (\Gamma_2\Gamma_1, r_2'r_1' \mid \Gamma_3 r_3')_i (\Gamma_2\Gamma_1, r_2 r_1 \mid \Gamma_3 r_3)_i^*$$
$$= \sum_i (\Gamma_1\Gamma_2, r_1'r_2' \mid \Gamma_3 r_3')_i (\Gamma_1\Gamma_2, r_1 r_2 \mid \Gamma_3 r_3)_i^* \tag{3.9.18'}$$

对于 $\Gamma_1\otimes\Gamma_2$ 中 Γ_3 不重复出现的情况(此时没有标号 i)，(3.9.18)式十分简单，不存在对 i 的求和，这说明$(\Gamma_1\Gamma_2, r_1r_2|\Gamma_3r_3)$与$(\Gamma_2\Gamma_1, r_2r_1|\Gamma_3r_3)$的绝对值相同，只可能差一个相因子，即

$$(\Gamma_1\Gamma_2, r_1r_2|\Gamma_3r_3) = \eta(\Gamma_2\Gamma_1, r_2r_1|\Gamma_3r_3) \quad \eta^2 = 1 \tag{3.9.19}$$

可以证明，存在重复出现时，(3.9.18′)式两端相同 i 的项分别相等，即(3.9.19)式变为

$$(\Gamma_1\Gamma_2, r_1r_2|\Gamma_3r_3)_i(\Gamma_1\Gamma_2, r_1r_2|\Gamma_3r_3)_i^*$$
$$= (\Gamma_2\Gamma_1, r_2r_1|\Gamma_3r_3)_i(\Gamma_2\Gamma_1, r_2r_1|\Gamma_3r_3)_i^*$$

亦即

$$(\Gamma_1\Gamma_2, r_1r_2|\Gamma_3r_3)_i = \eta(\Gamma_2\Gamma_1, r_2r_1|\Gamma_3r_3)_i \quad \eta^2 = 1 \tag{3.9.19'}$$

这是 C-G 系数的一个非常重要的性质，相因子可由不可约表示基矢的选择来确定.

(3.9.17)式中出现的是 $D^{(\Gamma_3)*}(g)$，因而 C-G 系数中 Γ_1, Γ_2 和 Γ_3 的地位是不同的. 为了研究 C-G 系数中 Γ_3 与 Γ_1 或 Γ_2 交换后的性质，须研究 $D^{(\Gamma_3)*}(g)$与 $D^{(\Gamma_3)}(g)$的关系，这就涉及到了基矢的选择.

2. C-G 系数 Γ_1 或 Γ_2 与 Γ_3 的交换对称性

为了寻求 C-G 系数中 Γ_1,Γ_2 与 Γ_3 交换的对称性，对不可约表示基矢进行标准化，并引入时间反演相因子，具有这种性质的基矢称为标准化基矢(关于这方面的详细讨论可参阅唐敖庆等著《配位场理论方法》)。

点群 G 的不可约表示标准化基矢 $\Psi_{\gamma_i}^{(\Gamma_i)}$ 在时间反演算子 $\hat{K}$ 作用下变为

$$\hat{K}\Psi_{\gamma_i}^{(\Gamma_i)} = [-1]^{\Gamma_i-\gamma_i}\Psi_{\bar{\gamma}_i}^{(\Gamma_i)} \tag{3.9.20}$$

其中 $\bar{\gamma}_i$ 是不可约表示 Γ_i 的分量中的一个，$[-1]^{\Gamma_i-\gamma_i}$为一相因子(即$([-1]^{\Gamma_i-\gamma_i})^2 = 1$)，称为时间反演因子，它们对具体群可具体定义.

对于这种标准化基矢下的标准化表示矩阵 $D^{\Gamma_i}(g)_{\gamma_i\gamma_i'}$具有性质

$$D^{(\Gamma_i)}(g)_{\gamma_i'\gamma_i}^* = [-1]^{\Gamma_i-\gamma_i+\Gamma_i-\gamma_i'}D^{(\Gamma_i^*)}(g)_{\bar{\gamma}_i'\bar{\gamma}_i} \tag{3.9.21}$$

Γ_i^* 为 Γ_i 的复光轭表示，此式是时间反演规约(3.9.20)式对标准表示矩阵 $D^{(\Gamma_1)}(g)$的要求，也就是说只要不可约表示(Γ_i)的标准基矢满足时间反演条件(3.9.20)式，则由它们得出的表示矩阵一定满足条件(3.9.21)式. 反之在不明确给出标准化基矢的情况下，只要表示矩阵满足条件(3.9.21)式，这种表示的基矢也是标准化的，而满足(3.9.20)式.

在第一章 1.9 节中已指出有限群的不可约表示分为 A, B, C 三类. A 类表示为实表示，对这类表示可选择一组实函构成的基矢，使它的表示矩阵为实矩阵. 因而对 A 类表

示在选择实基的情况下，(3.9.21)式变为

$$D^{(\Gamma_i)}(g)^*_{r_i'r_i} = D^{(\Gamma_i)}(g)_{r_i'r_i} = [-1]^{(\Gamma_i-r_i+\Gamma_i-r_i')}D^{(\Gamma_i)}(g)_{\bar{r}_i'\bar{r}_i}$$

因而 $r_i' = \bar{r}_i'$，$r_i = \bar{r}_i$，$[-1]^{\Gamma_i} = [-1]^{r_i} = 1.$

对于 B 类表示，虽然不可约表示(Γ)等价于复共轭表示(Γ^*)，但并不能通过变换使不可约表示(Γ)的表示矩阵 $D^{(\Gamma)}(g)$变为(Γ^*)的表示矩阵 $D^{(\Gamma^*)}(g) = D^{(\Gamma)}(g)^*$. 即$(\Gamma)\simeq(\Gamma^*)$，但$(\Gamma)\neq(\Gamma^*)$. 因而(3.9.20)式中的相因子需要具体确定.

对于 C 类表示，不可约表示的复共轭表示(Γ^*)并不与(Γ)等价，是另一个不等价的不可约表示. (3.9.20)式说明，时间反演把不可约表示(Γ)变为另一个与(Γ)不等价的表示(Γ^*)，情况将更为复杂.

对 A 和 B 类不可约表示把(3.9.21)式代入(3.9.17)式，并暂不考虑重复出现问题，则得到

$$\frac{[-1]^{\Gamma_3-r_3'}(\Gamma_1\Gamma_2, r_1'r_2' \mid \Gamma_3 r_3')[-1]^{\Gamma_3-r_3}}{\sqrt{\lambda(\Gamma_3)}}\frac{(\Gamma_1\Gamma_2, r_1r_2 \mid \Gamma_3r_3)^*}{\sqrt{\lambda(\Gamma_3)}}$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{g\in G} D^{(\Gamma_1)}_{r_1'r_1}(g)D^{(\Gamma_2)}_{r_2'r_2}D^{(\Gamma_3)}\quad(g)_{\bar{r}_3'\bar{r}_3} \tag{3.9.22}$$

这个公式给出了 C-G 系数的另一种对称性.

3. 点群的 V-系数

由公式(3.9.22)可看出可定义另外一种系数，这种系数与 $SO(3)$群的 3-j 符号一样对交换 Γ_1，Γ_2，Γ_3 都具有对称性.

其定义为

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & \bar{r}_3\end{pmatrix} = (-1)^{\Gamma_3-r_3}\frac{1}{\sqrt{\lambda(\Gamma_3)}}(\Gamma_1\Gamma_2, r_1r_2 \mid \Gamma_3r_3) \tag{3.9.23}$$

称为点群的 V-系数，则(3.9.22)式变为

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1' & r_2' & \bar{r}_3'\end{pmatrix}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & \bar{r}_3\end{pmatrix}^*$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{g\in G} D^{(\Gamma_1)}_{r_1'r_1}(g)D^{(\Gamma_2)}_{r_2'r_2}(g)D^{(\Gamma_3)}(g)_{\bar{r}_3'\bar{r}_3} \tag{3.9.24}$$

或

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1' & r_2' & r_3'\end{pmatrix}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}^*$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{g\in G} D^{(\Gamma_1)}(g)_{r_1'r_1}D^{(\Gamma_2)}(g)_{r_2'r_2}D^{(\Gamma_3)}(g)_{r_3'r_3} \tag{3.9.24'}$$

(3.9.24′)式是(3.9.18)式的推广. 说明 V-系数绝对值与 $\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3$ 顺序无关，因而不同顺序的数值只能差一相因子，即

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix} = \eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)V\begin{pmatrix}\Gamma_i & \Gamma_j & \Gamma_k\\ r_i & r_j & r_k\end{pmatrix} \tag{3.9.25}$$

当 i, j, k 为 1，2，3 的奇置换时，$\eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3) = -1$；当 i, j, k 为 1，2，3 的偶置换时，

$\eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)=1$. 如果确定了相因子 $\eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)$，只须计算数量比 C-G 系少得多的确定的 V-系数，就可由公式(3.9.25)得到全部 C-G 系数了. 比如有了 $V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}$就可得到全部$(\Gamma_i\Gamma_j,\ r_ir_j\mid\Gamma_kr_k)$($i, j, k$ 为 1, 2, 3 的置换). 由于 V-系数这种对称性，一般都造出 V-系数表，以代替 C-G 系数表，使用时把需要的 V-系数再计算成 C-G 系数. 这一点与 $SO(3)$ 群中的 3-j 符号是完全等同的.

当 Γ_3 存在重复出现时，上述讨论可以直接推广，只须加以重复出现角标. 由 C-G 系数的正交关系(3.9.11)式和(3.9.12)式可得到 V-系数的正交关系

$$\begin{cases}\sum_{r_1r_2}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}_iV\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3'\\ r_1 & r_2 & r_3'\end{pmatrix}_i^* = \dfrac{1}{\lambda(\Gamma_3)}\delta_{\Gamma_3\Gamma_3'}\delta_{r_3r_3'}\\ \sum_{\Gamma_3r_3i}\lambda(\sqrt{3})V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}_iV\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1' & r_2' & r_3\end{pmatrix}_i^* = \delta_{r_1r_1'}\delta_{r_2r_2'}\end{cases} \tag{3.9.26}$$

由(3.9.20)式和(3.9.23)式可得到对 A 和 B 类表示，V-系数具有如下性质：

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}_i^* = [-1]^{\Gamma_1-r_1+\Gamma_2-r_2+\Gamma_3-r_3}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \bar{r}_1 & \bar{r}_2 & \bar{r}_3\end{pmatrix}_i \tag{3.9.27}$$

对于 C 类表示，由于不可约表示 $D^{(\Gamma)}(g)$ 与 $D^{(\Gamma^*)}(g)$ 是不等价表示，前边讨论的时间反演性质将有所改变. 对此不进行仔细讨论，只给出 C 类表示 V-系数的定义和 V-系数的复共轭关系.

对 C 类表示，V-系数定义为

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3^*\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix} = (-1)^{\Gamma_2+\Gamma_2^*+\Gamma_3^*+r_3}\frac{1}{\sqrt{\lambda(\Gamma_3)}}(\Gamma_1\Gamma_2,\ r_1r_2\mid\Gamma_3^*r_3) \tag{3.9.28}$$

对 A 和 B 类表示 $\Gamma^*=\Gamma$(即一个表示 Γ 与它的复共轭表示 Γ^* 是等价的). (3.9.28)式恢复为(3.9.24′)式，因而此时 V-系数为

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1' & r_2' & r_3'\end{pmatrix}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}^*$$

$$=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}D^{(\Gamma_1)}(g)_{r_1'r_1}D^{(\Gamma_2)}(g)_{r_2'r_2}D^{(\Gamma_3)}(g)_{r_3'r_3} \tag{3.9.29}$$

3.10　点群的再耦合系数与 W-系数

对于不可约表示 Γ_1, Γ_2, Γ_3 的直积可分解为不可约表示 Γ 的直和，这种直积分解为

$$\Gamma_1\otimes\Gamma_2\otimes\Gamma_3=\sum_\Gamma a_\Gamma\Gamma \tag{3.10.1}$$

a_Γ 为不可约表示 Γ 在直积中出现的重复度. 在这三个不可约基矢的耦合过程中，可分两种方式进行. 第一种方式是先耦合 $\Psi^{\Gamma_1}\Psi^{\Gamma_2}$ 再耦合 Ψ^{Γ_3}，即

$$[\Psi^{\Gamma_1}\Psi^{\Gamma_2}]_{r_{12}}^{\Gamma_{12}}=\sum_{r_1r_2}(\Gamma_1\Gamma_2,\ r_1r_2\mid\Gamma_{12}r_{12})\Psi_{r_1}^{\Gamma_1}\Psi_{r_2}^{\Gamma_2}$$

$$[(\Psi^{\Gamma_1}\Psi^{\Gamma_2})^{\Gamma_{12}}\Psi^{\Gamma_3}]_{r_r}^{\Gamma r} = \sum_{r_{12}r_3}(\Gamma_{12}\Gamma_3, r_{12}r_3 \mid \Gamma r)(\Psi^{\Gamma_1}\Psi^{\Gamma_2})\Psi_{\Gamma_{12}}^{\Gamma_{12}}\Psi_{r_3}^{\Gamma_3}$$
$$= \sum_{r_1r_2}\sum_{r_{12}r_3}(\Gamma_1\Gamma_2, r_1r_2 \mid \Gamma_{12}r_{12})(\Gamma_{12}\Gamma_3, r_{12}r_3 \mid \Gamma r)\Psi_{r_1}^{\Gamma_1}\Psi_{r_2}^{\Gamma_2}\Psi_{r_3}^{\Gamma_3} \tag{3.10.2}$$

另一种方式是先耦合 Ψ^{Γ_2}, Ψ^{Γ_3}, 再耦合 Ψ^{Γ_1}, 即

$$[\Psi^{\Gamma_2}\Psi^{\Gamma_3}]_{r_{23}}^{\Gamma_{23}} = \sum_{r_2r_3}(\Gamma_2\Gamma_3, r_2r_3 \mid \Gamma_{23}r_{23})\Psi_{r_2}^{\Gamma_2}\Psi_{r_3}^{\Gamma_3}$$
$$[\Psi^{\Gamma_1}(\Psi^{\Gamma_2}\Psi^{\Gamma_3})^{\Gamma_{23}}]_r^{\Gamma} = \sum_{r_1r_{23}}(\Gamma_1\Gamma_{23}, r_1r_{23} \mid \Gamma r)\Psi_{r_1}^{\Gamma_1}(\Psi^{\Gamma_2}\Psi^{\Gamma_3})_{r_{23}}^{\Gamma_{23}}$$
$$= \sum_{r_1r_2r_3r_{23}}(\Gamma_1\Gamma_{23}, r_1r_{23} \mid \Gamma r)(\Gamma_2\Gamma_3, r_2r_3 \mid \Gamma_{23}r_{23})\Psi_{r_1}^{\Gamma_1}\Psi_{r_2}^{\Gamma_2}\Psi_{r_3}^{\Gamma_3} \tag{3.10.3}$$

显然(3.10.2)和(3.10.3)式给出的两种耦合基矢

$$[(\Psi^{\Gamma_1}\Psi^{\Gamma_2})^{\Gamma_{12}}\Psi^{\Gamma_3}]_r^{\Gamma} \quad 与 \quad [\Psi^{\Gamma_1'}(\Psi^{\Gamma_2}\Psi^{\Gamma_3})^{\Gamma_{23}}]_r^{\Gamma}$$

之间存在一个酉变换，令这个变换为$((\Gamma_1\Gamma_2)\Gamma_{12}, \Gamma_3\Gamma \mid \Gamma_1(\Gamma_2\Gamma_3)\Gamma_{23})$，称为再耦合系数，即

$$[\Psi^{\Gamma_1}(\Psi^{\Gamma_2}\Psi^{\Gamma_3})^{\Gamma_{23}}]_r^{\Gamma}$$
$$= \sum_{\Gamma_{12}}((\Gamma_1\Gamma_2)\Gamma_{12}, \Gamma_3, \Gamma \mid \Gamma_1, (\Gamma_2\Gamma_3)\Gamma_{23}, \Gamma)[(\Psi^{\Gamma_1}\Psi^{\Gamma_2})^{\Gamma_{12}}\Psi^{\Gamma_3}]_r^{\Gamma} \tag{3.10.4}$$

用$[(\Psi^{\Gamma_1}\Psi^{\Gamma_2})^{\Gamma_{12}}\Psi^{\Gamma_3}]_r^{\Gamma *}$乘以上式并进行积分，代入(3.10.2)和(3.10.3)式得到

$$((\Gamma_1\Gamma_2)\Gamma_{12}, \Gamma_3, \Gamma \mid \Gamma_1, (\Gamma_2, \Gamma_3)\Gamma_{23}, \Gamma)$$
$$= \int [(\Psi^{\Gamma_1}\Psi^{\Gamma_2})^{\Gamma_{12}}\Psi^{\Gamma_3}]_r^{\Gamma *}[\Psi^{\Gamma_1}(\Psi^{\Gamma_2}\Psi^{\Gamma_3})^{\Gamma_{23}}]_r^{\Gamma}\mathrm{d}\tau$$
$$= \sum_{r_1r_2r_3}\sum_{r_{12}r_{23}}(\Gamma_1\Gamma_2, r_1r_2 \mid \Gamma_{12}r_{12})^*(\Gamma_{12}\Gamma_3, r_{12}r_3 \mid \Gamma r)^*$$
$$\cdot(\Gamma_1\Gamma_{23}, r_1r_{23} \mid \Gamma r)(\Gamma_2\Gamma_3, r_2r_3 \mid \Gamma_{23}r_{23}) \tag{3.10.5}$$

上式左端与 r 无关，于是两端对 r 求和，然后除以 $\lambda(\Gamma)$，则等式不变. 于是利用(3.9.23)式把 C-G 系数换为 V-系数，并利用关系

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}^* = [-1]^{\Gamma_1-r_1+\Gamma_2-r_2+\Gamma_3-r_3}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \bar{r}_1 & \bar{r}_2 & \bar{r}_3\end{pmatrix} \tag{3.10.6}$$

则可得到

$$((\Gamma_1\Gamma_2)\Gamma_{12}, \Gamma_3, \Gamma \mid \Gamma_1, (\Gamma_2\Gamma_3)\Gamma_{23}, \Gamma)$$
$$= [\lambda(\Gamma_{12})\lambda(\Gamma_{23})]^{\frac{1}{2}}(-1)^{\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+\Gamma}\eta(\Gamma_1\Gamma_{23}\Gamma)\eta(\Gamma_2\Gamma_3\Gamma_{23})$$
$$\cdot\sum_{r_1r_2r_3}\sum_{r_{12}r_{23}r}[-1]^{\Gamma_1-r_1+\Gamma_2-r_2+\Gamma_3-r_3+\Gamma_{12}-r_{12}+\Gamma_{23}-r_{23}+\Gamma-r}$$
$$\cdot V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_{32}\\ \bar{r}_1 & \bar{r}_2 & r_{12}\end{pmatrix}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma & \Gamma_{23}\\ r_1 & r & \bar{r}_{23}\end{pmatrix}V\begin{pmatrix}\Gamma_3 & \Gamma_2 & \Gamma_{23}\\ \bar{r}_3 & r_2 & r_{23}\end{pmatrix}V\begin{pmatrix}\Gamma_3 & \Gamma & \Gamma_{12}\\ r_3 & \bar{r} & r_{12}\end{pmatrix} \tag{3.10.7}$$

对于(3.10.7)式给出的再耦合系数，可引入一个对称性更好的 W-系数，为此令

$$W\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_{12} \\ \Gamma_3 & \Gamma & \Gamma_{13} \end{pmatrix}$$

$$= \sum_{r_1r_2r_3}\sum_{r_{12}r_{23}r}[-1]^{\Gamma_1-r_1+\Gamma_2-r_2+\Gamma_3-r_3+\Gamma_{12}-r_{12}+\Gamma_{23}-r_{23}+\Gamma-r}$$

$$\cdot V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_{12} \\ \bar{r}_1 & \bar{r}_2 & r_{12} \end{pmatrix} V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma & \Gamma_{23} \\ r_1 & r & \bar{r}_{23} \end{pmatrix} V\begin{pmatrix} \Gamma_3 & \Gamma_2 & \Gamma_{23} \\ \bar{r}_3 & r_2 & r_{23} \end{pmatrix} V\begin{pmatrix} \Gamma_3 & \Gamma & \Gamma_{12} \\ r_3 & \bar{r} & r_{12} \end{pmatrix} \quad (3.10.8)$$

称为 W-系数，它由 6 个不可约表示构成，也可称 6-Γ 符号，与 $SO(3)$ 的 6-j 符号是完全相类似的. 为了方便，通常把不可约表示 $\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_{12}\Gamma_3\Gamma\Gamma_{13}$ 记为 a, b, c, d, e, f, 则 W-系数

$$W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta\varepsilon\psi}[-1]^{a-\alpha+b-\beta+c-\gamma+d-\delta+e-\varepsilon+f-\psi}$$

$$\cdot V\begin{pmatrix} a & b & c \\ \bar{\alpha} & \bar{\beta} & \bar{\gamma} \end{pmatrix} V\begin{pmatrix} a & e & f \\ \alpha & \varepsilon & \bar{\psi} \end{pmatrix} V\begin{pmatrix} d & b & f \\ \bar{\delta} & \beta & \psi \end{pmatrix} V\begin{pmatrix} d & e & c \\ \delta & \bar{\varepsilon} & \gamma \end{pmatrix} \quad (3.10.9)$$

显然它的非零条件是：

$$a\otimes b \ni c, \quad a\otimes e \ni f, \quad d\otimes b \ni f, \quad d\otimes e \ni c \quad (3.10.10)$$

在上面讨论中没有考虑直积分解中的重复出现问题，在有重复出现的情况下，W-系数的定义为

$$W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}_{\mu\upsilon\sigma\pi} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta\varepsilon\psi}(-1)^{a-\alpha+b-\beta+c-\gamma+d-\delta+e-\varepsilon+f-\psi}$$

$$\cdot V\begin{pmatrix} a & b & c \\ \bar{\alpha} & \bar{\beta} & \bar{\gamma} \end{pmatrix}_\mu V\begin{pmatrix} a & e & f \\ \alpha & \varepsilon & \bar{\psi} \end{pmatrix}_\upsilon V\begin{pmatrix} d & b & f \\ \bar{\delta} & \beta & \psi \end{pmatrix}_\sigma V\begin{pmatrix} d & e & c \\ \delta & \bar{\varepsilon} & \gamma \end{pmatrix}_\pi \quad (3.10.11)$$

如果某个直积没有重复出现，那一位的相应脚标字母记为 0.

对 A 和 B 类表示

$$W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}_{\mu\upsilon\sigma\pi} = W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}^*_{\mu\upsilon\sigma\pi} \quad (3.10.12)$$

即 W-系数为实数. W-系数与 6-j 符号一样有很好的列置换对称性，即

$$W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}_{\mu\upsilon\sigma\pi} = \theta W\begin{pmatrix} b & a & c \\ e & d & f \end{pmatrix}_{\mu\sigma\upsilon\pi} = \theta W\begin{pmatrix} c & b & a \\ d & e & f \end{pmatrix}_{\mu\pi\sigma\upsilon} \quad (3.10.13)$$

其中

$$\theta = \eta(abc)\eta(aef)\eta(dbf)\eta(def) = \pm 1$$

和对称性

$$W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}_{\mu\upsilon\sigma\pi} = W\begin{pmatrix} d & e & c \\ a & b & f \end{pmatrix}_{\pi\sigma\upsilon\mu} = W\begin{pmatrix} a & e & f \\ d & b & c \end{pmatrix}_{\upsilon\mu\pi\sigma} \quad (3.10.14)$$

θ 为一相因子. 还具有如下的正交归一性质：

$$\sum_c \lambda(c) W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & g \end{pmatrix} = \delta_{fg}\frac{\delta(aef)\delta(dbf)}{\lambda(f)} \quad (3.10.15)$$

其中

$$\delta(abc)=\begin{cases}1, & a\otimes b\ni c\\ 0, & a\otimes b\not\ni c\end{cases}$$

和性质

$$\sum_{c}(-1)^{c+f+g}\lambda(c)W\begin{pmatrix}a & b & c\\ d & e & f\end{pmatrix}W\begin{pmatrix}a & b & c\\ e & d & f\end{pmatrix}=W\begin{pmatrix}a & e & f\\ b & d & g\end{pmatrix} \tag{3.10.16}$$

当涉及到4个不可约表示耦合时，将出现与9个不可约表示有关系的X-系数，它完全类似于$SO(3)$群的9-j符号，这里就不讨论了.

3.11 O群的V-系数和W-系数

作为点群C-G系数的一个实例，本节讨论O群的V-系数和W-系数.

3.11.1 O群不可约表示直积分解

O群有5个单值表示，即A_1，A_2，E，T_1，T_2，它们都是A类表示即实表示，还有三个双值表示，即E'，E''和U'，它们都是B类表示. 单值表示为A类表示(即$\sum_{g\in O}\chi^{(\Gamma)}(g^1)=1$)，双值表示为$B$类表示(即$\sum_{g\in O}\chi^{(\Gamma)}(g^2)=-1$).

表3.11.1给出了不可约表示直积分解.

表3.11.1 O群不可约表示直积分解

O	A_1	A_2	E	T_1	T_2	E'	E''	U'
A_1	A_1	A_2	E	T_1	T_2	E'	E''	U'
A_2	A_2	A_1	E	T_2	T_1	E''	E'	U'
E	E	E	$A_1\oplus A_2\oplus E$	$T_1\oplus T_2$	$T_1\oplus T_2$	U'	U'	$E'\oplus E''\oplus U'$
T_1	T_1	T_2	$T_1\oplus T_2$	$A_1\oplus E\oplus T_1\oplus T_2$	$A_2\oplus E\oplus T_1\oplus T_2$	$E'\oplus U'$	$E''\oplus U'$	$E'\oplus E''\oplus 2U'$
T_2	T_2	T_1	$T_1\oplus T_2$	$A_2\oplus E\oplus T_1\oplus T_2$	$A_1\oplus E\oplus T_1\oplus T_2$	$E''\oplus U'$	$E'\oplus U'$	$E'\oplus E''\oplus 2U'$
E'	E'	E'	U'	$E'\oplus U'$	$E''\oplus U'$	$A_1\oplus T_1$	$A_2\oplus T_2$	$E\oplus T_1\oplus T_2$
E''	E''	E''	U'	$E''\oplus U'$	$E'\oplus U'$	$A_2\oplus T_2$	$A_1\oplus T_1$	$E\oplus T_1\oplus T_2$
U'	U'	U'	$E'\oplus E''\oplus U'$	$E'\oplus E''\oplus 2U'$	$E'\oplus E''\oplus U'$	$E\oplus T_1\oplus T_1$	$E\oplus T_1\oplus T_1$	$A_1\oplus A_2\oplus E\oplus 2T_1\oplus 2T_2$

3.11.2 O群不可约表示的标准化基矢与不可约表示的标准矩阵

1. 标准化基矢与标准化基矢下的表示矩阵

在(3.4.2)节中已给出了O群单值不可约表示的表示矩阵和相应的基矢，这些基矢为：

$$A_1: r^2,\quad T_1: \{x, y, z\},\quad A_2: xyz$$

$$T_2: \{xy, xz, yz\},\quad E: \{2z^2-x^2-y^2, x^2-y^2\}$$

引入球坐标$z=r\cos\theta$，$x=r\sin\theta\cos\varphi$，$y=r\sin\theta\cos\varphi$，并把上述基矢归一化，得到

$$
\begin{cases}
\Psi_a^{(A_1)}(\theta,\ \varphi) = N_{A_1}\dfrac{r^2}{r^2} = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
\Psi_b^{(A_2)}(\theta,\ \varphi) = N_{A_2}\dfrac{xyz}{r^3} = \dfrac{\sqrt{105}}{4\sqrt{\pi}}\sin^2\theta\cos\theta\sin^2\varphi = \mathrm{Y}_{2s}^3(\theta,\ \varphi) \\
\Psi_\theta^{(E)}(\theta,\ \varphi) = N_E\dfrac{2z^2-x^2-y^2}{r^2} = \dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{5}{4\pi}}(3\cos^2\theta-1) = \mathrm{Y}_0^2(\theta,\ \varphi) \\
\Psi_\varepsilon^E(\theta,\ \varphi) = N_E\dfrac{x^2-y^2}{r^2} = \dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\sin^2\theta\cos^2\varphi = \mathrm{Y}_{2c}^2(\theta,\ \varphi) \\
\Psi_x^{T_1}(\theta,\ \varphi) = N_{T_1}\dfrac{x}{r} = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\varphi = \mathrm{Y}_{1c}^1(\theta,\ \varphi) \\
\Psi_y^{T_1}(\theta,\ \varphi) = N_{T_1}\dfrac{y}{r} = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\varphi = \mathrm{Y}_{1s}^1(\theta,\ \varphi) \\
\Psi_z^{T_1}(\theta,\ \varphi) = N_{T_1}\dfrac{z}{r} = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta = \mathrm{Y}_0^1(\theta,\ \varphi) \\
\Psi_\rho^{T_2}(\theta,\ \varphi) = N_{T_2}\dfrac{xy}{r^2} = \dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\sin^2\theta\cos^2\varphi = \mathrm{Y}_{2s}^2(\theta,\ \varphi) \\
\Psi_\eta^{T_2}(\theta,\ \varphi) = N_{T_2}\dfrac{xy}{r^2} = \sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi = \mathrm{Y}_{1c}^2(\theta,\ \varphi) \\
\Psi_\xi^{T_2}(\theta,\ \varphi) = N_{T_2}\dfrac{yz}{r} = \sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi = \mathrm{Y}_{1s}^2(\theta,\ \varphi)
\end{cases}
\tag{3.11.1}
$$

因为 $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ 对于绕通过坐标系原点的任何轴旋转都是一个不变量，因而在上述归一化过程中把原来的基矢除以 r，r^2，r^3 等并不改变这些基矢在点群 O 作用下的性质，归一化后给出的基矢是正交归一的，即

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\Psi_\xi^{(\Gamma)}(\theta,\ \varphi)^*\,\Psi_\eta^{(\Gamma')}(\theta,\ \varphi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi = \delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{\xi\eta}$$

这些基矢实质上都是实球谐函数 $\mathrm{Y}_{m_s}^l(\theta,\ \varphi)$ 或 $\mathrm{Y}_{m_c}^l(\theta,\ \varphi)$，$\mathrm{Y}_{m_c}^l(\theta,\ \varphi)$ 为 $\mathrm{Y}_m^l(\theta,\ \varphi)$ 和 $\mathrm{Y}_{-m}^l(\theta,\ \varphi)$ 中的实部，$\mathrm{Y}_{m_s}^l(\theta,\ \varphi)$ 为相应的虚部，即

$$\mathrm{Y}_{m_c}^l(\theta,\ \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\mathrm{Y}_m^l(\theta,\ \varphi)+\mathrm{Y}_{\bar{m}}^l(\theta,\ \varphi)]$$

$$\mathrm{Y}_{m_s}^l(\theta,\ \varphi) = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}[\mathrm{Y}_m^l(\theta,\ \varphi)-\mathrm{Y}_{\bar{m}}^l(\theta,\ \varphi)]$$

由于球谐函数 $\mathrm{Y}_m^l(\theta,\ \varphi)$ 是正交归一化的，即

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\mathrm{Y}_m^{(l)*}(\theta,\ \varphi)\mathrm{Y}_{m'}^{l'}(\theta,\ \varphi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}y = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

因而实球谐函数也是正交归一化的.

(3.11.1)式是 O 群不可约表示的实基，为了计算方便通常对不可约表示 T_1 和 T_2 引入复基. 不可约表示 T_1 的复基的定义为

$$\begin{cases} \Psi_1^{(T_1)}(\theta,\varphi) = -\frac{i}{\sqrt{2}}\Psi_x^{(T_1)}(\theta,\varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_y^{(T_1)} = iY_1^1(\theta,\varphi) \\ \Psi_0^{(T_1)}(\theta,\varphi) = i\Psi_z^{(T_1)}(\theta,\varphi) = iY_0^1(\theta,\varphi) \\ \Psi_{-1}^{(T_1)}(\theta,\varphi) = \frac{i}{\sqrt{2}}\Psi_x^{(T_1)}(\theta,\varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_y^{(T_1)} = iY_{-1}^1(\theta,\varphi) \end{cases} \quad (3.11.2)$$

不可约表示 T_2 的复基定义为

$$\begin{cases} \Psi_1^{(T_2)}(\theta,\varphi) = -\frac{i}{\sqrt{2}}\Psi_\xi^{(T_2)} + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_\eta^{(T_2)} = iY_1^2(\theta,\varphi) \\ \Psi_0^{(T_2)}(\theta,\varphi) = i\Psi_\zeta^{(T_2)}(\theta,\varphi) = iY_{1c}^2(\theta,\varphi) \\ \Psi_{-1}^{(T_2)}(\theta,\varphi) = \frac{i}{\sqrt{2}}\Psi_\zeta^{(T_2)} + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_\eta^{(T_2)} = iY_{-1}^2(\theta,\varphi) \end{cases} \quad (3.11.3)$$

由上面讨论可以看到，由不可约表示 T_1 和 T_2 的实基变换为复基的变换矩阵为

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

O 群的不可约表示标准基矢取为 $\Psi_a^{(A_1)}$，$\Psi_b^{(B_1)}$，$\{\Psi_\theta^{(E)}, \Psi_\varepsilon^{(E)}\}$ 和复基 $\{\Psi_1^{(T_1)}, \Psi_0^{(T_1)}, \Psi_{-1}^{T_1}\}$，$\{\Psi_1^{(T_2)}, \Psi_0^{(T_2)}, \Psi_{-1}^{T_2}\}$.

3.4.2 节给出的 O 群各种不可约表示矩阵，对于不可约表示 A_1，A_2 和 E_1 那里使用的基矢本身就是标准化基矢 $\Psi_{a_1}^{A_1}$，$\Psi_{a_1}^{A_1}$，$(\Psi_\theta^{(E)}, \Psi_\varepsilon^{E})$，因而它们就是标准化表示矩阵. 对于不可约表示矩阵需要变换为基矢 $(\Psi_1^{(T_1)}, \Psi_0^{(T_1)}, \Psi_{-1}^{(T_1)})$ 和 $(\Psi_1^{(T_2)}, \Psi_0^{(T_2)}, \Psi_{-1}^{(T_2)})$ 下的矩阵，这种变换可由变换矩阵 A 得到，即

$$D^{(T_1)}(g) = A^{-1}\bar{D}^{(T_1)}(g)A$$

$$D^{(T_2)}(g) = A^{-1}\bar{D}^{(T_2)}(g)A$$

其中 $\bar{D}^{(T_1)}(g)$ 和 $\bar{D}^{(T_2)}(g)$ 就是 3.4.2 节中得到的不可约表示 T_1 和 T_2 的表示矩阵.

2. O 群标准化基矢的特点及时间反演相因子

1° 标准化基矢的特点

由(3.11.1)式或(3.11.2)，(3.11.3)式给出的 O 群的标准化基矢，是由 $l=0, 1, 2, 3$ 的球谐函数 $Y_m^l(\theta,\varphi)$ 的线性组合构成的. 而球谐函数 $\{Y_m^l(\theta,\varphi); m=l, l-1, \cdots, -l\}$ 构成了 $SO(3)$ 群不可约表示 (l) 的标准基矢. 在量子力学中球谐函数是轨道角动量平方 $\hat{L}^2$ 及其子分量 $\hat{L}_z$ 的共同本征态. 它们满足方程

$$\begin{cases} \hat{L}^2 Y_m^l(\theta,\varphi) = h^2 l(l+1) Y_m^l(\theta,\varphi) \\ \hat{L}_3 Y_m^l(\theta,\varphi) = hm Y_m^l(\theta,\varphi) \end{cases} \quad (3.11.4)$$

或

$$\begin{cases}\hat{L}_z Y_m^l(\theta,\varphi) = hmY_m^l(\theta,\varphi)\\ \hat{L}_\pm Y_m^l(\theta,\varphi) = h\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}Y_{m\pm1}^l(\theta,\varphi)\end{cases}\tag{3.11.4'}$$

其中

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm \mathrm{i}\hat{L}_y$$

由满足方程(3.11.4′)的函数 $Y_m^l(\theta,\varphi)$ 为基矢，可得到 $SO(3)$ 群不可约表示矩阵.

$$\begin{cases} D(\alpha\beta\gamma)_{m',m}^{(l)} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\alpha}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\gamma}d_{(\beta)_{m'm}}^{(l)}\\ d^{(l)}(\beta)_{m',m} = \sum_k \dfrac{(-1)^k\sqrt{(l-m)!(l+m)!(l-m')!(l+m')!}}{k!\sqrt{(l+m'-k)!(l-m-k)!(k-m'+m)!}}\\ \qquad\cdot\left(\cos\dfrac{\beta}{2}\right)^{2l+m'-m-2k}\left(\sin\dfrac{\beta}{2}\right)^{2k+m-m'}\end{cases}\tag{3.11.5}$$

((3.11.5)式的推导见本书第十章). 也可以证明，如果 $SO(3)$ 群不可约表示矩阵具有(3.11.5)式给出的形式，则它的基矢一定满足方程(3.11.4′)，称满足(3.11.4′)的函数为 $SO(3)$ 群不可约表示的标准基矢. (3.11.5)式描述的不可约表示矩阵为标准表示矩阵.

由 $SO(3)$ 群的标准不可约表示矩阵(3.11.5)出发利用类似于(3.9.17)式的 $SO(3)$ 的相应公式可求出 $SO(3)$ 群的 C-G 系数 $(l_1l_2,\ m_1m_2|LM)$，于是可得到耦合基矢，即

$$[Y^{l_1}Y^{l_2}]_M^L = \sum_{m_1m_2}(l_1l_2,\ m_1m_2\mid LM)Y_{m_1}^{l_1}(\theta,\varphi)Y_{m_2}^{l_2}(\theta,\varphi)$$

可以证明 $[Y^{l_1}Y^{l_2}]_M^L$ 也满足方程(3.11.4′)，即

$$\hat{L}_z[Y^{l_1}Y^{l_2}]_M^L = hm[Y^{l_1}Y^{l_2}]_M^L$$

$$\hat{L}_\pm[Y^{l_1}Y^{l_2}]_M^L = h\sqrt{(L\mp M+1)(L\pm M+1)}[Y^{l_1}Y^{l_2}]_{M\pm1}^L$$

这里

$$\hat{L}_z = \hat{L}_{1z}+\hat{L}_{2z}\quad,\quad \hat{L}_\pm = (\hat{L}_{1x}+\hat{L}_{2x})\pm(\hat{L}_{1y}+\hat{L}_{2y})$$

因而用群算子 $\hat{P}(\alpha\beta\gamma)$ 作用于耦合基矢 $[Y^{l_1}Y^{l_2}]_M^L$，得到

$$\hat{P}(\alpha\beta\gamma)[Y^{l_1}Y^{l_2}]_M^L = \sum_{M'}D^{(L)}(\alpha\beta\gamma)_{M'M}[Y^{l_1}Y^{l_2}]_{M'}^L\tag{3.11.6}$$

其中表示矩阵 $D^{(L)}(\alpha\beta\gamma)_{M'M}$ 也是(3.11.5)给出的标准矩阵.

由于 O 群标准化基矢是 $SO(3)$ 群标准化基矢的线性组合，因而由这些标准基矢得到的表示矩阵也是标准化的. 利用由它们得到的 O 群的 C-G 系数 $(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2|\Gamma\gamma)$，则耦合基

$$[\Psi^{(\Gamma_1)}\Psi^{(\Gamma_2)}]_\gamma^{(\Gamma)} = \sum_{\gamma_1\gamma_2}(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2\mid\Gamma\gamma)\Psi_{\gamma_1}^{(\Gamma_1)}\Psi_{\gamma_2}^{(\Gamma_2)}$$

在 O 群算子 $\hat{P}(g)$ 作用下为

$$\hat{P}(g)[\Psi_p^{(\Gamma_1)}\Psi^{(\Gamma_2)}]_\gamma^{(\Gamma)} = \sum_{\gamma_1'}D^{(\Gamma)}(g)_{\gamma'\gamma}[\Psi^{(\Gamma_1)}\Psi^{(\Gamma_2)}]_{\gamma'}^{(\Gamma)}$$

而其中的表示矩阵 $D^{(\Gamma)}(g)_{\gamma'\gamma}$ 与(3.11.6)式一样也是由标准化基矢得到的表示矩阵.

实际上 O 群是 $SO(3)$ 群的子群，$SO(3)$ 群的不可约表示 (l) 的表示空间 $\{Y_m^l(\theta,\varphi)$；

$m=l, l-1, \cdots, l\}$对子群 O 是可约的空间，它可约化为若干 O 群的不变子群空间的直和. 比如 1 维空间 Y_0^0，对 O 群也是不可约的空间，它给出 O 群一维不可约表示. 3 维空间$\{Y_m^1; m=1, 0, -1\}$对子群 O 群仍然是不变空间，而且其中不存在其它不变子空间，它给出 O 群不可约表示 T_1 的表示空间. 5 维空间$\{Y_m^2; m=2, 1, 0, -1, -2\}$对 O 群可约化为两个不变子空间，它们分别给出不可约表示 E 和 T_2. 7 维空间$\{Y_m^3; m=3, 2, 1, 0, -1, -2, -3\}$对于 O 群可分解为三个不变子空间，其中一个 1 维的子空间给出不可约表示 A_2，另两个 3 维不变子空间分别给出 O 群的不可约表示 T_1 和 T_2. 可以证明利用 $Y_m^3(\theta, \varphi)$线性组合得到不可约表示 T_1 和 T_2 的两套新的基矢，由它们得到的 T_1 和 T_2 的不可约表示矩阵与由标准化基矢(3.11.2)和(3.11.3)得到的表示矩阵是完全相同的.

2° 标准化基矢的时间反演性质和时间反演相因子

时间反演算子 $\hat{K}$ 作用于时间无关的函数 $f(\boldsymbol{r})$ 等于对函数 f 取算数共轭，即

$$\hat{K}f=f^*$$

由此定义容易得到球谐函数的时间反演性质

$$\hat{K}Y_m^l=(-1)^m Y_{-m}^l \tag{3.11.7}$$

利用这种关系可以研究 O 群标准化基矢的时间反演性质.

$$\begin{cases} \hat{K}\Psi_a^{(A_1)} = \Psi_a^{(A_1)} \\ \hat{K}\Psi_b^{(A_2)} = \Psi_b^{(A_2)} \\ \hat{K}\Psi_\theta^{(E)} = \Psi_\theta^{(E)} \\ \hat{K}\Psi_\varepsilon^{(E)} = \Psi_\varepsilon^{(E)} \end{cases} \tag{3.11.8}$$

这表明不可约表示 A_1, A_2, E 是实基，它们在时间反演下保持不变.

对于不可约表示 T_1 和 T_2 的基矢，时间反演变化为

$$\begin{cases} \hat{K}\Psi_1^{(T_1)} = \Psi_{-1}^{(T_1)} \\ \hat{K}\Psi_0^{(T_1)} = -\Psi_0^{(T_1)} \\ \hat{K}\Psi_{-1}^{(T_1)} = \Psi_1^{(T_1)} \\ \hat{K}\Psi_1^{(T_2)} = \Psi_{-1}^{(T_2)} \\ \hat{K}\Psi_0^{(T_2)} = -\Psi_0^{(T_2)} \\ \hat{K}\Psi_{-1}^{(T_2)} = \Psi_1^{(T_2)} \end{cases} \tag{3.11.9}$$

由(3.11.9)式给出的基矢的时间反演性质

$$\hat{K}\Psi_\gamma^{(\Gamma)}=[-1]^{\Gamma-\gamma}\Psi_{\bar{\gamma}}^{(\Gamma)}$$

由(3.11.8)式和(3.11.9)式可定出 O 群标准化基矢的时间反演相因子，它们为

(1) 不可约表示 A_1, A_2 和 E 是实基，因而时间反演相因子$[-1]^\Gamma=1$, $[-1]^\gamma=1$，而且对 2 维表示 E 的两个分量(θ, ε)有 $\bar{\theta}=\theta$, $\bar{\varepsilon}=\varepsilon$.

(2) 对不可约表示 T_1 和 T_2 的复基，时间反演相因子为$[-1]^\Gamma=-1$, $\Gamma=T_1, T_2$, $[-1]^\gamma=-1$, $\gamma=1, -1$.

确定基矢的时间反演相因子后，便可确定标准表示矩阵的时间反演性质. 以时间反演算子 $\hat{K}$ 作用于公式

$$\hat{P}(g)\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)} = \sum_{\gamma'} D^{(\Gamma)}(g)_{\gamma'\gamma}\Psi_{\gamma'}^{(\Gamma)}$$

得到

$$\begin{aligned}\hat{K}\cdot\hat{P}(g)\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)} &= \sum_{\gamma'} D^{(\Gamma)}(g)_{\gamma'\gamma}^{*}K\Psi_{\gamma'}^{(\Gamma)} \\ &= \sum_{\gamma'} D^{(\Gamma)}(g)_{\gamma'\gamma}^{*}[-1]^{\Gamma-\gamma'}\Psi_{\bar{\gamma}'}^{(\Gamma)}\end{aligned}$$

由于 $\hat{K}$ 与 $\hat{P}(g)$ 可交换，因而

$$\begin{aligned}\hat{K}\cdot\hat{P}(g)\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)} &= \hat{P}(g)\hat{K}\cdot\Psi_{\gamma}^{(\Gamma)} = \hat{P}(g)[-1]^{\Gamma-\gamma}\Psi_{\bar{\gamma}}^{(\Gamma)} \\ &= [-1]^{\Gamma-\gamma}\sum_{\gamma'} D^{(\Gamma)}(g)_{\gamma',\bar{\gamma}}\Psi_{\gamma'}^{(\Gamma)}\end{aligned}$$

因而得到

$$[-1]^{\Gamma-\gamma}\sum_{\gamma'} D^{(\Gamma)}(g)_{\gamma,\bar{\gamma}}\Psi_{\gamma'}^{(\Gamma)} = \sum_{\gamma'} D^{(\Gamma)}(g)_{\gamma',\gamma}^{*}[-1]^{\Gamma-\gamma'}\Psi_{\bar{\gamma}'}^{(\Gamma)}$$

由此立即得到

$$D^{(\Gamma)}(g)_{\gamma',\gamma}^{*} = [-1]^{\Gamma-\gamma+\Gamma-\gamma'}D^{(\Gamma)}(g)_{\bar{\gamma}',\bar{\gamma}} \tag{3.11.10}$$

上述讨论对 A 类和 B 类表示是正确的，但是对 C 类表示，一个表示与它的复共轭表示是不等价的两个表示，因而(3.11.10)式须修改为

$$D^{(\Gamma)}(g)_{\gamma',\gamma}^{*} = [-1]^{\Gamma-\gamma+\Gamma-\gamma'}D^{(\Gamma^{*})}(g)_{\bar{\gamma}',\bar{\gamma}} \tag{3.11.10'}$$

不可约表示 Γ^{*} 为 Γ 的复共轭表示，但是它们并不等价，而对 A 和 B 类不可约表示 $\Gamma\simeq\Gamma^{*}$. 因而(3.11.10)式是(3.11.10′)式的特殊情况，而 O 群全部单值表示都是 A 类表示，双值表示为 B 类表示. (3.11.10)式对 O 群是完全正确的.

3° 关于 $SO(3)$ 群标准化基矢时间反演问题的说明

前面已指出 $SO(3)$ 群标准化基矢为 $\mathrm{Y}_m^l(\theta,\varphi)$，但它的时间反演性质为

$$\hat{K}\mathrm{Y}_m^l = (-1)^m\mathrm{Y}_{\bar{m}}^l \tag{3.11.11}$$

通常称(3.11.11)式为 $SO(3)$ 群标准化基矢的 Condon-Shortley 相位规约. 但是容易得到

$$\hat{K}[\mathrm{Y}^{l_1}\mathrm{Y}^{l_2}]_M^L = (-1)^{L-M}[\mathrm{Y}^{l_1}\mathrm{Y}^{l_2}]_{\bar{M}}^L$$

即耦合基矢与基矢有不同的时间反演性质. 为了使耦合基矢与基矢有相同的时间反演性质，后来把球谐函数 Y_m^l 归一化常数乘以 $(i)^l$，定义

$$\mathscr{Y}_m^l(\theta,\varphi) = (i)^l\mathrm{Y}_m^l(\theta,\varphi)$$

此时

$$\hat{K}\mathscr{Y}_m^l = (-1)^{l-m}\mathscr{Y}_{\bar{m}}^l$$

以 $\mathscr{Y}_m^l(\theta,\varphi)$ 为 $SO(3)$ 群不可约表示基矢所得到的表示矩阵仍然为(3.11.5)式，但是使基矢与耦合基矢具有了相同的时间反演性质，因而函数集合 $\{\mathscr{Y}_m^l(\theta,\varphi)\}$ 是 $SO(3)$ 群空间性质和时间性质上都标准化了的标准化基矢. 由(3.11.2)和(3.11.3)式可看到，O 群标准化基矢实际上是 $\{\mathscr{Y}_m^l\}$ 的线性组合，因而它们也包括了正确的时间反演对称性.

3.11.3 O 群单值表示的 V-系数

O 群的单值表示直积分解中不包括重复出现，因而(3.9.17)式中不包括对重复指标 i 的求和，把表示矩阵的时间反演性质(3.11.10)式代入没有对 i 求和的(3.9.17)式得到决定 C-G 系数的(3.9.21)式和决定 V-系数的(3.9.23)式，即

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1' & \gamma_2' & \gamma_3'\end{pmatrix}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3\end{pmatrix}^*$$
$$=\frac{1}{24}\sum_{g\in O}D^{(\Gamma_1)}(g)_{\gamma_1',\gamma_1}D^{(\Gamma_2)}(g)_{\gamma_2',\gamma_2}D^{(\Gamma_3)}(g)_{\gamma_3',\gamma_3} \tag{3.11.12}$$

可以证明 O 群 C-系数为实数，因而从此式可求出全部 V-系数.

当取 $\gamma_1'=\gamma_1$，$\gamma_2'=\gamma_2$，$\gamma_3'=\gamma_3$ 时，(3.11.12)式变为

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3\end{pmatrix}^2=\frac{1}{24}\sum_{g\in O}D^{(\Gamma_1)}(g)_{\gamma_1,\gamma_1}D^{(\Gamma_2)}(g)_{\gamma_2,\gamma_2}D^{(\Gamma_3)}(g)_{\gamma_3,\gamma_3} \tag{3.11.12′}$$

由此可看到 V-系数对交换 Γ_1，Γ_2 和 Γ_3 具有对称性，即交换 Γ_1，Γ_2，Γ_3. V-系数绝对值不变，只差一个因子(±1). 因而对 $\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3$ 进行偶置换 V-系数数值不变，因为偶置换相当两次奇置换，$(\pm1)^2=1$，于是可定义

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_i & \Gamma_j & \Gamma_k\\ \gamma_i & \gamma_j & \gamma_k\end{pmatrix}=\eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3\end{pmatrix}$$
$$=\begin{cases}(-1)^{\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3\end{pmatrix}, & ijk\text{ 为 123 的奇置换}\\ V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3\end{pmatrix}, & ijk\text{ 为 123 的偶置换}\end{cases} \tag{3.11.13}$$

相因子$(-1)^{\Gamma}$将在后面给出，(3.11.13)式与 $SO(3)$ 群的 3-j 符号的交换对称性是十分相似的，即

$$\begin{pmatrix}j_i & j_j & j_k\\ m_i & m_j & m_k\end{pmatrix}=\begin{cases}(-1)^{j_1+j_2+j_3}V\begin{pmatrix}j_1 & j_2 & j_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}, & ijk\text{ 为 123 的奇置换}\\ \begin{pmatrix}j_1 & j_2 & j_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}, & ijk\text{ 为 123 的偶置换}\end{cases}$$

确定 $\eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)$ 归结为确定$(-1)^{\Gamma_i}$.

当 $\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3$ 互不相同时，对相因子 $\eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)$ 的确定，有一定的任意性，但是对于 $\eta(\Gamma\Gamma\Gamma_3)$ 在物理上有特定要求，不能随意确定. 比如

$$\Psi_{r_3}^{(\Gamma_3)}(\tau\tau)=\sum_{r_1r_2}(\tau\tau,r_1r_2\mid\Gamma_3r_3)\Psi_{r_1}^{(\tau)}(1)\Psi_{r_2}^{(\tau)}(2)$$

$$=\lambda(\Gamma_3)\sum_{r_1r_2}(-1)^{\Gamma_3-r_3}V\begin{pmatrix}\tau & \tau & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & \bar{r}_3\end{pmatrix}\Psi_{r_1}^{(\tau)}(1)\Psi_{r_2}^{(\tau)}(2)$$

$$=\sum_{r_1r_2}\lambda(\Gamma_3)(-1)^{\Gamma_3-r_3}V\begin{pmatrix}\tau & \tau & \Gamma_3\\ r_2 & r_1 & \bar{r}_3\end{pmatrix}\Psi_{r_2}^{(\tau)}(2)\Psi_{r_1}^{(\tau)}(1) \tag{3.11.13}$$

两个等式代表粒子 1 和 2 相互交换坐标，因而相因子 $\eta(\tau\tau\Gamma_3)$ 不能随意指定，需要根据物理上对波函数 $\Psi_{r_3}^{(\Gamma_3)}(\tau\tau)$ 交换粒子坐标的奇偶性的要求来确定.

电子除坐标外，尚有自旋，完全的波函数可分为自旋和轨道两个部分的乘积，(3.11.14)式只是轨道部分. 两个电子的双电子态的不可约表示一定为 $^{2s+1}\Gamma(\tau^2)$，其中 s 为总自旋，$s=0$ 或 $s=1$，Γ 为 $\tau\otimes\tau$ 中的一个. 总波函数当交换两个粒子(同时交换空间坐标与自旋)时，对 Fermi 子为反对称表示. 而交换自旋对 $s=1$ 的三重态是对称的，因而三重态的 Γ 对交换坐标就是反对称态. 对 $s=0$ 的单重态，交换自旋是反对称态，因而相应 Γ 对交换坐标就是对称态. 由于 Pauli 原理组态 τ^2 形成的 $^{2s+1}\Gamma$ 态，$s=1$ 和 $s=0$ 时，出现的 Γ 是完全一定的.

如果不可约表示 τ 是 $\lambda(\tau)$ 维的，τ 上分布两个电子可能的状态数为 $\lambda(\tau)[2\lambda(\tau)-1]$，因而

$$\sum_{\Gamma}3\lambda(\Gamma)+\sum_{\Gamma'}\lambda(\Gamma')=\frac{\lambda(\tau)[\lambda(\tau)-1]}{2},\quad \tau\otimes\tau\supset\Gamma,\ \Gamma'$$

其中：Γ 为允许的三重态的不可约表示，Γ' 为允许的单重态的不可约表示.

对于 O 群组态 e^2 和组态 t_2^2 可能得到的状态 $^{2s+1}\Gamma$(或称谱项)为

$$e^2\to{}^1A_1+{}^1E+{}^3A_2$$

$$t_2^2\to{}^1A_1+{}^1E+{}^1T_2+{}^3T_1$$

因而 A_1，E，T_2 对交换电子坐标是对称态(自旋单重态对交换自旋是反对称态)，A_2 和 T_2 对交换坐标是反对称态(自旋三重态对交换自旋是对称态). 这可记为

$$(-1)^{A_1}=(-1)^{E}=(-1)^{T_2}=1,\ (-1)^{A_2}=(-1)^{T_1}=-1$$

在确定了不可约表示的奇偶性后，可定义 $\eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)$ 为

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}=\begin{cases}(-1)^{\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3}V\begin{pmatrix}\Gamma_i & \Gamma_j & \Gamma_k\\ r_i & r_j & r_k\end{pmatrix}, & \Gamma_i\Gamma_j\Gamma_k\text{ 为 }\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3\text{ 的奇置换}\\ V\begin{pmatrix}\Gamma_i & \Gamma_j & \Gamma_k\\ r_i & r_j & r_k\end{pmatrix}, & \Gamma_i\Gamma_j\Gamma_k\text{ 为 }\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3\text{ 的偶置换}\end{cases}$$

这种定义保证了 τ^2 状态的奇偶性，对 $\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3$ 不同的情况，奇偶性没有确定的物理意义，只是一种明确的约定.

相因子 $\eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)$ 的这种定义

$$\eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)=(-1)^{\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3} \tag{3.11.14}$$

对点群的绝大部分情况都适用，只是各别情况存在例外，这种情况是当 $\tau\otimes\tau$ 包括两个 Γ，而其中一个属于对称性表示，另一个属于反对称性表示，需要对(3.11.13)式加以修正. 如 O 群的四维双值表示 U'，在 $U'\otimes U'$ 中出现两个 T_2，其中一个是对称表示，另一个

是反对称表示. 为了概括这种情况，定义

$$\eta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)=(-1)^{\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3}\theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)_i \tag{3.11.15}$$

比如对

$$\eta(U'U'T_2)=(-1)^{U'+U'+T_2}\theta(U'U'T_2)_i$$
$$\theta(U'U'T_2)_1=1 \quad \theta(U'U'T_2)_2=-1$$

(3.11.15)式为 η 因子的普遍定义，但绝大多数情况下 $\theta(\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3)=1$.

下面给出了 O 群的单值表示的 V-系数表：

e	e	A_2	V
θ	e	a_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
e	θ	a_2	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$

e	e	e	V
θ	θ	θ	$-\frac{1}{2}$
θ	e	e	$\frac{1}{2}$
e	θ	e	$\frac{1}{2}$
e	e	θ	$\frac{1}{2}$

T_1	T_2	A_2	V
1	$\bar{1}$	a_2	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
0	0	a_2	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$
$\bar{1}$	1	a_2	$\frac{1}{\sqrt{3}}$

T_1 T_2	T_1 T_2	e e	V
1	$\bar{1}$	θ	$\frac{1}{2\sqrt{3}}$
1	1	e	$\frac{1}{2}$
0	0	θ	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
$\bar{1}$	$\bar{1}$	e	$\frac{1}{2}$
$\bar{1}$	1	θ	$\frac{1}{2\sqrt{3}}$

T_1	T_2	e	V
1	1	θ	$\frac{1}{2}$
1	$\bar{1}$	e	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}$
0	0	e	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$
$\bar{1}$	1	e	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}$
$\bar{1}$	$\bar{1}$	θ	$\frac{1}{2}$

T_1 T_2	T_1 T_2	T_2 T_2	V
1	1	0	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$
1	0	1	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$
0	1	1	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$
0	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$
$\bar{1}$	0	$\bar{1}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$
$\bar{1}$	$\bar{1}$	0	$\frac{1}{\sqrt{6}}$

$$V\begin{pmatrix} T_1 & T_1 & T_1 \\ r_1 & r_2 & r_3 \end{pmatrix}=V\begin{pmatrix} T_2 & T_2 & T_2 \\ r_1 & r_2 & r_3 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{6}}\varepsilon_{r_1r_2r_3}$$

$$\varepsilon_{r_1r_2r_3}=\begin{cases} 1, & \text{当 } r_1r_2r_3 \text{ 为 } 10\bar{1} \text{ 的偶置换时} \\ -1, & \text{当 } r_1r_2r_3 \text{ 为 } 10\bar{1} \text{ 的奇置换时} \\ 0, & \text{其它情况} \end{cases}$$

由 V-系数表利用定义 V-系数的(3.9.23)式就可计算出全部 C-G 系数了.

在 V-系数表中 $V\begin{pmatrix} A_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ a & \gamma_1 & \gamma_2 \end{pmatrix}$可表示为

$$V\begin{pmatrix} A_1 & \Gamma & \Gamma' \\ a & \gamma & \gamma' \end{pmatrix}=[-1]^{\Gamma+\gamma}\frac{1}{\sqrt{\lambda(\Gamma)}}\delta_{\Gamma\Gamma'}\delta_{\bar{\gamma}\gamma'} \tag{3.11.16}$$

这个公式与 $SO(3)$ 群中相应的 3-j 符号类似，即

$$\begin{pmatrix} 0 & j_1 & j_2 \\ 0 & m_1 & m_2 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1+m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 \bar{m}_2}$$

而且对所有点群包括恒等表示 A_1 的 V-系数均可由(3.11.16)式表达.

V-系数还具有性质

$$V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ r_1 & r_2 & r_3 \end{pmatrix} = [-1]^{\Gamma_1-\gamma_1+\Gamma_2-\gamma_2+\Gamma_3-\gamma_3} V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ \bar{r}_1 & \bar{r}_2 & \bar{r}_3 \end{pmatrix}$$

这也与 3-j 符号的性质

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3+m_1+m_2+m_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \bar{m}_1 & \bar{m}_2 & \bar{m}_3 \end{pmatrix}$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \bar{m}_1 & \bar{m}_2 & \bar{m}_3 \end{pmatrix}$$

十分相似, 3-j 符号的非零条件要求 $m_1+m_2+m_3=0$. 所有点群的 V-系数 $V\begin{pmatrix} A_1 & \Gamma & \Gamma' \\ a & r & r' \end{pmatrix}$ 均为

$$V\begin{pmatrix} A_1 & \Gamma & \Gamma' \\ a & r & r' \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{\Gamma+r}}{\lambda(\Gamma)} = \delta_{\Gamma\Gamma'} \delta_{rr'}$$

3.11.4　O 群单值表示的 W-系数

O 群单值表示的直和不存在重复出现问题, 因而 W-系数也没有重复出现标记. 利用已得到的 V-系数可计算出 W-系数, W-系数具有正交性,

$$\sum_c \lambda(c) W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & g \end{pmatrix} = \delta_{fg} \delta(aef) \delta(dbf) \frac{1}{\lambda(f)} \qquad (3.11.17)$$

其中符号

$$\delta(aef) = \begin{cases} 1, & a \otimes e \ni f \\ 0, & a \otimes e \ni f \end{cases}$$

而且满足如下方程

$$\sum_c \lambda(c)(-1)^{f+g+c} W\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} W\begin{pmatrix} a & b & c \\ e & d & g \end{pmatrix} = W\begin{pmatrix} a & e & f \\ b & d & g \end{pmatrix} \qquad (3.11.18)$$

下面给出了 O 群单值表示的 W-系数:

$$W\begin{pmatrix} A_1 & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} = (-1)^{b+d+e} \{\lambda(b)\lambda(e)\}^{-1/2} \delta_{bc} \delta_{ef} \delta(bde)$$

$$W\begin{pmatrix} T & T & T \\ T & T & T \end{pmatrix} = \frac{1}{6},$$ 其中 T 可以是 T_1 或 T_2

$$\begin{pmatrix} A_2 & E & E \\ A_2 & E & E \end{pmatrix} = \frac{1}{2}, \quad \begin{pmatrix} A_2 & E & E \\ E & E & E \end{pmatrix} = \frac{1}{2}, \quad \begin{pmatrix} A_2 & E & E \\ T_1 & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$\begin{pmatrix} A_2 & E & E \\ T_2 & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad \begin{pmatrix} A_2 & T_1 & T_2 \\ A_2 & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}, \quad \begin{pmatrix} A_2 & T_1 & T_2 \\ E & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}$$

$$\begin{pmatrix} A_2 & T_1 & T_2 \\ E & T_2 & T_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}, \quad \begin{pmatrix} A_2 & T_1 & T_2 \\ T_1 & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}, \quad \begin{pmatrix} A_2 & T_1 & T_2 \\ T_1 & T_2 & T_1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{3}$$

$$\begin{pmatrix} A_2 & T_1 & T_2 \\ T_2 & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{3}, \quad \begin{pmatrix} A_2 & T_1 & T_2 \\ T_2 & T_2 & T_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}, \quad \begin{pmatrix} E & E & E \\ E & E & E \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} E & E & E \\ T_1 & T_1 & T_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad \begin{pmatrix} E & E & E \\ T_1 & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad \begin{pmatrix} E & E & E \\ T_1 & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}}$$

$$\begin{pmatrix} E & E & E \\ T_2 & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_1 \\ E & T_1 & T_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_1 \\ E & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} E & T_1 & T_1 \\ E & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{3}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_2 \\ E & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_2 \\ E & T_2 & T_1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{3}$$

$$\begin{pmatrix} E & T_1 & T_2 \\ E & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = 0, \quad \begin{pmatrix} E & T_2 & T_2 \\ E & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_1 \\ T_1 & T_1 & T_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{6}$$

$$\begin{pmatrix} E & T_1 & T_1 \\ T_1 & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_1 \\ T_1 & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{6}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_1 \\ T_2 & T_1 & T_1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{6}$$

$$\begin{pmatrix} E & T_1 & T_1 \\ T_2 & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_1 \\ T_2 & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{6}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_2 \\ T_1 & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{6}$$

$$\begin{pmatrix} E & T_1 & T_2 \\ T_1 & T_2 & T_1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{6}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_2 \\ T_1 & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_2 \\ T_2 & T_1 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{6}$$

$$\begin{pmatrix} E & T_1 & T_2 \\ T_2 & T_2 & T_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{6}, \quad \begin{pmatrix} E & T_1 & T_2 \\ T_2 & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad \begin{pmatrix} E & T_2 & T_2 \\ T_1 & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{6}$$

$$\begin{pmatrix} E & T_2 & T_2 \\ T_2 & T_2 & T_2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{6}$$

3.12 点群不可约张量算子和 Wigner-Eckart 定理

3.12.1 点群不可约张量算子

前面讨论的都是空间变换群对于定义在这个空间中的函数的作用，定义为群算子 $\hat{P}(g)$ 对函数 $f(\boldsymbol{r})$ 的作用，即

$$\hat{P}(g)f(\boldsymbol{r}) = f(g^{-1}\boldsymbol{r}) .$$

群算子 $\hat{P}(g)$ 同样也可作用于定义在这个空间上的算子 $\hat{U}$，其作用为

$$\hat{P}(g) \cdot \hat{U} \cdot \hat{P}(g)^{-1} = \hat{U}' \tag{3.12.1}$$

即在群算子 $\hat{P}(g)$ 作用下，使算子 $\hat{U}$ 变为 $\hat{U}'$.

Racah 在研究复杂原子光谱理论时引入了 $SO(3)$ 群的不可约张量算子的概念. 他定义由 $(2k+1)$ 个算子组成的一组算子 $\{\hat{U}_q^{(k)};\ q=-k,\ -k+1,\ \cdots,\ k-1,\ k\}$，如果在 $SO(3)$ 群的无穷小算子 $\hat{J}_\pm$，$\hat{J}_0$ 作用下，这组算子满足条件

$$\begin{cases}[\hat{J}_z,\ \hat{U}_q^k]=q\hat{U}_q^k\\ [\hat{J}_\pm,\ \hat{U}_q^k]=[(k\mp q)(k\pm q+1)]^{\frac{1}{2}}\hat{U}_{q\pm 1}^k\end{cases}\tag{3.12.2}$$

则称 $\{\hat{U}_q^k\}$ 为 $SO(3)$ 群的 k 秩不可约张量算子. 可以证明，关于 $SO(3)$ 群张量算子的这种定义与

$$\hat{P}(R)\cdot\hat{U}_q^k\cdot\hat{P}(R)^{-1}=\sum_{q'}D^{(k)}(R)_{qq'}\hat{U}_{q'}^k\tag{3.12.3}$$

是完全等价的，其中 $D^{(k)}(R)$ 为 $SO(3)$ 的不可约表示 (k) 的表示矩阵. 因而 $SO(3)$ 群 k 秩不可约张量算子 $\{\hat{U}_q^k,\ q=-k,\ -k+1,\ \cdots,\ k-1,\ k\}$ 也可由 (3.12.3) 式定义，其中 $\hat{P}(R)$ 是 $SO(3)$ 群群元素 $R(\alpha,\ \beta,\ \gamma)$ 相对应的群算子.

把 (3.12.3) 推广到点群，可定义点群不可约张量算子.

定义 3.12.1　点群 G 的不可约张量算子：如果有一组 $\lambda(\Gamma)$ 个算子 $\{\hat{U}_{r_i}^{(\Gamma)},\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ \lambda(\Gamma)\}$ （$\lambda(\Gamma)$ 为点群 G 的不可约表示 Γ 的维数)），它们在点群算子 $\hat{P}(g)$，$g\in G$ 的作用下，按如下规则变换，即

$$\hat{P}(g)\cdot\hat{U}_{r_i}^{(\Gamma)}\cdot\hat{P}(g)^{-1}=\sum_{r_i'}D^{(\Gamma)}(g)_{r_i'r_i}\hat{U}_{r_i'}^{(\Gamma)}\tag{3.12.4}$$

则称算子 $\{\hat{U}_{r_i}^{(\Gamma)},\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ \lambda(\Gamma)\}$ 为按点群 G 的不可约表示 Γ 变换的不可约张量算子.

$SO(3)$ 群的不可约张量算子 $\{\hat{U}_q^{(K)}\}$ 可由 C-G 系数构成耦合张量算子，即

$$[\hat{U}^{K_1}\hat{U}^{K_2}]_{m_3}^{K_3}=\sum_{m_1m_2}(K_1K_2,\ m_1m_2\mid K_3m_3)\hat{U}_{m_1}^{K_1}\hat{U}_{m_2}^{K_2}\tag{3.12.5}$$

容易证明耦合张量算子 $[\hat{U}^{(K_1)}\hat{U}^{K_2}]_{m_3}^{(K_3)}$ 仍然满足 (3.12.2) 式和 (3.12.3) 式，它们仍然是不可约张量算子. 对于点群 G 的不可约张量算子也可由点群 C-G 系数构成耦合张量算子，即

$$[\hat{U}^{\Gamma_1},\ \hat{U}^{\Gamma_2}]_{r_3}^{K_3}=\sum_{r_1r_2}(\Gamma_1\Gamma_2,\ r_1r_2\mid\Gamma_3r_3)\hat{U}_{r_1}^{\Gamma_1}\hat{U}_{r_2}^{\Gamma_2}\tag{3.12.6}$$

用群算子 $\hat{P}(g)$ 作用 (3.12.6) 式得到

$$\begin{aligned}&\hat{P}(g)\cdot[\hat{U}^{(\Gamma_1)},\ \hat{U}^{(\Gamma_2)}]_{r_3}^{\Gamma_3}\cdot\hat{P}(g)^{-1}\\ &=\sum_{r_1r_2}(\Gamma_1\Gamma_2,\ r_1r_2\mid\Gamma_3r_3)\hat{P}(g)\hat{U}_{r_1}^{(\Gamma_1)}\cdot\hat{P}(g)^{-1}\cdot\hat{P}(g)\hat{U}_{r_2}^{(\Gamma_2)}\hat{P}(g)^{-1}\\ &=\sum_{r_1r_2}(\Gamma_1\Gamma_2,\ r_1r_2\mid\Gamma_3r_3)\sum_{r_1'r_2'}D^{(\Gamma_1)}(g)_{r_1'r_1}D^{(\Gamma_2)}(g)_{r_2'r_2}\hat{U}_{r_1'}^{(\Gamma_1)}\hat{U}_{r_2'}^{(\Gamma_2)}\end{aligned}$$

把 (3.9.15) 式代入上式，得到

$$
\begin{aligned}
&\hat{P}(g)\cdot[\hat{U}^{(\Gamma_1)}\hat{U}^{(\Gamma_2)}]_{r_3}^{(\Gamma_3)}\hat{P}(g)^{-1}\\
&=\sum_{r_1'r_2'}\sum_{r_3'}(\Gamma_1\Gamma_2,r_1'r_2'\mid\Gamma_3r_3')D^{(\Gamma_3)}(g)_{r_3'r_3}\hat{U}_{r_1'}^{\Gamma_1}\hat{U}_{r_2'}^{\Gamma_2}\\
&=\sum_{r_3'}D^{(\Gamma_3)}(g)_{r_3'r_3}[\hat{U}^{(\Gamma_1)},\hat{U}^{(\Gamma_2)}]_{r_3'}^{\Gamma_3} \qquad (3.12.7)
\end{aligned}
$$

这便证明了由(3.12.6)式定义的耦合算子是群 G 按不可约表示 Γ_3 变换的不可约张量算子.

3.12.2　点群不可约张量算子的 Wigner-Eckart 定理

计算群 G 的不可约张量算子对于群 G 的不可约表示基矢之间的矩阵元，在量子力学中是十分重要的，而这种矩阵元的计算存在一种普遍适用的规律，就是 W-E 定理(简称 W-E 定理).

对于 $SO(3)$ 的不可约张量算子 $\hat{U}_q^k$ 和不可约表示基矢 $\Psi_m^{(j)}$ 之间的矩阵元，存在 $SO(3)$ 群的 W-E 定理，即

$$
\begin{aligned}
\int\psi_{m_1}^{(j_1)*}\hat{U}_2^k\psi_{m_2}^{(j_2)}\mathrm{d}\tau &= \langle j_1m_1\mid\hat{U}_2^k\mid j_2m_2\rangle\\
&=(-1)^{j_1-m_1}\begin{pmatrix} j_1 & k & j_2\\ m_2 & q & m_2\end{pmatrix}\langle j_1\parallel U^k\parallel j_2\rangle \qquad (3.12.8)
\end{aligned}
$$

其中$\langle j_1\parallel\hat{U}^k\parallel j_2\rangle$与基矢和算子的分量 m_1, m_2, q 无关，称为约化矩阵元.

点群同样也存在类似的 W-E 定理.

定理 3.12.1　点群不可约张量算子的 Wigner-Eckart 定理：点群 G 的不可约张量算子 $\hat{U}_{q_i}^{(\Gamma)}(i=1,2,3,\cdots,\lambda(\Gamma))$对于点群不可约表示基矢 $\Psi_{r_1}^{(\Gamma_1)}$, $\Psi_{r_2}^{(\Gamma_2)}$的矩阵元为

$$
\begin{aligned}
\langle\Psi_{r_1}^{(\Gamma_1)}\mid\hat{U}_{q_i}^{(\Gamma)}\mid\Psi_{r_2}^{(\Gamma_2)}\rangle &= \int\Psi_{r_1}^{(\Gamma_1)*}\hat{U}_{q_i}^{(\Gamma_2)}\Psi_{r_2}^{(\Gamma_2)}\mathrm{d}\tau\\
&=\sum_j(-1)^{\Gamma_1-\gamma_1}V\begin{pmatrix}\Gamma_1{}^* & \Gamma_2 & \Gamma^*\\ \bar{r}_1 & r_2 & q_i\end{pmatrix}_j^*\langle\Psi^{(\Gamma_1)}\parallel\hat{U}^{(\Gamma)}\parallel\Psi^{(\Gamma_2)}\rangle_j \qquad (3.12.9)
\end{aligned}
$$

其中$\langle\Psi^{(\Gamma_1)}\parallel\hat{U}^{(\Gamma)}\parallel\Psi^{(\Gamma_2)}\rangle_j$为约化矩阵元，对 j 的求和表示对直积 $\Gamma_1\otimes\Gamma_2$ 中重复出现的 Γ 进行求和.

如果 $\Gamma_1\otimes\Gamma_2$ 不包括重复出现的 Γ，则(3.12.9)式没有对 j 的求和. 如果不可约表示 Γ_1 和 Γ_2 均为 A 和 B 类表示，则 $\Gamma^*\cong\Gamma$, $\Gamma_1^*\cong\Gamma_1$，(3.12.9)式中的 V 系数简化为 $\Gamma_1\Gamma_2$ 和 Γ 的 V-系数.

证明　矩阵元$\langle\Psi_{r_1}^{(\Gamma_1)}\mid\hat{U}_{q_i}^{(\Gamma)}\mid\Psi_{r_2}^{(\Gamma_2)}\rangle$是一个数，因而在群算子作用下不变，即

$$
\langle\Psi_{r_1}^{(\Gamma_1)}\mid\hat{U}_{q_i}^{(\Gamma)}\mid\Psi_{r_2}^{(\Gamma_2)}\rangle=\langle\Psi_{r_1}^{(\Gamma_1)}\mid\hat{P}(g)^{-1}\cdot\hat{P}(g)\hat{U}_{q_i}^{(\Gamma)}\hat{P}(g)^{-1}\cdot\hat{P}(g)\mid\Psi_{r_2}^{(\Gamma_2)}\rangle
$$

按定义可得到

$$
\begin{aligned}
&\langle\Psi_{r_1}^{(\Gamma_1)}\mid\hat{U}_{q_i}^{(\Gamma)}\mid\Psi_{r_2}^{(\Gamma_2)}\rangle\\
&=\sum_{r_1'q_i'r_2'}D^{(\Gamma_1)}(g)_{r_1'r_1}^{*}D(g)_{q_i'q_i}^{(\Gamma)}D^{(\Gamma_2)}(g)_{r_2'r_2}\langle\Psi_{r_1'}^{(\Gamma_1)}\mid\hat{U}_{q_i'}^{(\Gamma)}\mid\Psi_{r_2'}^{(\Gamma_2)}\rangle \qquad (3.12.10)
\end{aligned}
$$

由公式(3.9.23)得到

$$\frac{1}{n}\sum_{g\in G}D^{(\Gamma_1)}(g)_{r_1'r_1}D^{(\Gamma)}(g)_{q_i'q_i}D^{(\Gamma_2)}(g)_{r_2'r_2}$$
$$=(-1)^{\Gamma_1-\gamma_1'+\Gamma_1-\gamma_1}\sum_i V\begin{pmatrix}\Gamma_1^* & \Gamma_2 & \Gamma^* \\ \bar{r}_1' & r_2' & q_i'\end{pmatrix}_j V\begin{pmatrix}\Gamma_1^* & \Gamma_2 & \Gamma^* \\ \bar{r}_1 & r_2 & q_i\end{pmatrix}_j^*$$

因而(3.12.10)变为

$$\langle \Psi_{r_1}^{(\Gamma_1)} \mid U_{q_i}^{(\Gamma)} \mid \Psi_{r_2}^{(\Gamma_2)}\rangle$$
$$=\sum_j(-1)^{\Gamma_1-\gamma_1}V\begin{pmatrix}\Gamma_1^* & \Gamma_2 & \Gamma \\ \bar{r}_1 & r_2 & q_i\end{pmatrix}_j^*$$
$$\cdot\sum_{r_1'r_2'q_i'}(-1)^{\Gamma_1-\gamma_1'}V\begin{pmatrix}\Gamma_1^* & \Gamma_2 & \Gamma^* \\ \bar{r}_1' & r_2' & q_i'\end{pmatrix}_j\langle \Psi_{r_1}^{(\Gamma_1)} \mid \hat{U}_{q_i}^{(\Gamma)} \mid \Psi_{r_2}^{(\Gamma_2)}\rangle \tag{3.12.11}$$

显然上式求和号后面的部分与分量 $r_1r_2q_i$ 无关，因而定义

$$\langle \Psi^{(\Gamma_1)} \parallel \hat{U}^{\Gamma} \parallel \Psi^{(\Gamma_2)}\rangle_j$$
$$=\sum_{r_1'r_2'q_i'}(-1)^{\Gamma_1-\gamma_1'}V\begin{pmatrix}\Gamma_1^* & \Gamma_2 & \Gamma^* \\ \bar{r}_1' & r_2' & q_i'\end{pmatrix}_j\langle \Psi_{r_1'}^{(\Gamma_1)} \mid \hat{U}_{q_i'}^{(\Gamma)} \mid \Psi_{r_2'}^{(\Gamma_2)}\rangle_j \tag{3.12.12}$$

于是

$$\langle \Psi_{r_1}^{(\Gamma_1)} \mid \hat{U}_{q_i}{}^{\Gamma} \mid \Psi_{r_2}^{(\Gamma_2)}\rangle$$
$$=\sum_j(-1)^{\Gamma_1-\gamma_1}V\begin{pmatrix}\Gamma_1^* & \Gamma_2 & \Gamma^* \\ \bar{r}_1 & r_2 & q_i\end{pmatrix}_j\langle \Psi^{(\Gamma_1)} \parallel \hat{U}^{(\Gamma)} \parallel \Psi^{(\Gamma_2)}\rangle_j \tag{3.12.13}$$

这就证明了 W-E 定理.

对于 A 类和 B 类不可约表示基矢的时间反演规约要求

$$\hat{K}_0\Psi_r^{(\Gamma)}=[-1]^{\Gamma-\gamma}\Psi_{\bar{r}}^{(\Gamma)}$$

不可约张量算子的时间反演规约为

$$\hat{K}_0\hat{U}_q^{(\Gamma)}\hat{K}_0{}^{-1}=[-1]^{\Gamma-q}\hat{U}_{\bar{q}}^{(\Gamma)}$$

因而容易得到约化矩阵元具有性质

$$\langle \Psi^{(\Gamma_1)} \parallel \hat{U}^{(\Gamma)} \parallel \Psi^{(\Gamma_2)}\rangle_j^*=\langle \Psi^{(\Gamma_1)} \parallel \hat{U}^{(\Gamma)} \parallel \Psi^{(\Gamma_2)}\rangle_j \tag{3.12.14}$$

在得到上式时利用了

$$V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ r_1 & r_2 & r_3\end{pmatrix}_i^*=[-1]^{\Gamma_1-\gamma_1+\Gamma_2-\gamma_2+\Gamma_3-\gamma_3}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ \bar{r}_1 & \bar{r}_2 & \bar{r}_3\end{pmatrix}_i$$

这表明 A, B 类不可约表示的约化矩阵元为实数，但是对 C 类表示，由于 Γ^* 与 Γ 不等价，因而约化矩阵元

$$\langle \Psi^{(\Gamma_1)} \parallel \hat{U}^{(\Gamma)} \parallel \Psi^{(\Gamma_2)}\rangle^*=\langle \Psi^{(\Gamma_1^*)} \parallel \hat{U}^{(\Gamma^*)} \parallel \Psi^{(\Gamma_2^*)}\rangle \tag{3.12.15}$$

不一定是实数.

(3.12.9)式给出的 W-E 定理说明点群不可约张量算子与不可约表示基矢的矩阵元可分为两部分，第一部分为与张量算子性质无关而由群对称性决定的 V-系数，而第二部分由具体张量算子决定的约化矩阵元，因此，通常称 V-系数部分为几何因子，约化矩阵元为物理因子.

3.12.3 耦合不可约张量算子的 Wigner-Eckart 定理

为了简单假定直积没有重复出现，于是对于耦合张量算子

$$[\hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)}]_\rho^{(\pi)} = \sum_{\rho_1\rho_2}(\pi_1\pi_2,\rho_1\rho_2 \mid \pi\rho)\hat{T}_{\rho_1}^{(\pi_1)}\hat{V}_{\rho_2}^{(\pi_2)}$$

作用于耦合基矢

$$\Psi_\gamma^{(\Gamma)}(\tau_1\tau_2) = \sum_{r_1r_2}(\tau_1\tau_2,r_1r_2 \mid \Gamma\gamma)\Psi_{r_1}^{(\tau_1)}\Psi_{r_2}^{(\tau_2)}$$

它的矩阵元按 W-E 定理为

$$\begin{aligned}&\langle \Psi_{\alpha_1}^{(\Gamma_1)}(\tau_1\tau_2) \mid [\hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)}]_\rho^\pi \mid \Psi_{\alpha_2}^{(\Gamma_2)}(\tau_1'\tau_2')\rangle\\ &=[-1]^{\Gamma_1-\alpha_1}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \pi\\ \bar{\alpha}_1 & \alpha_2 & \rho\end{pmatrix}^*\\ &\langle \Psi^{(\Gamma_1)}(\tau_1\tau_2) \,\|\, [\hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)}]^\pi \,\|\, \Psi^{(\Gamma_2)}(\tau_1'\tau_2')\rangle\end{aligned} \tag{3.12.16}$$

如果算子 $\hat{T}^{(\pi_1)}$ 和 $\hat{T}^{(\pi_2)}$ 分别作用于基矢中 τ_1，τ_1'，τ_2，τ_2' 所在的空间，则把不可约算子和基矢展开，于是

$$\begin{aligned}&\langle \Psi_{\alpha_1}^{\Gamma_1}(\tau_1\tau_2) \mid [\hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)}]_\rho^\pi \mid \Psi_{\alpha_2}^{(\Gamma_2)}(\tau_1'\tau_2')\rangle\\ &=\sum_{r_1r_2}\sum_{r_1'r_2'}\sum_{q_1q_2}[-1]^{\Gamma_1-\alpha_1+\Gamma_2-\alpha_2+\pi-\rho}[\lambda(\pi)\lambda(\Gamma_1)\lambda(\Gamma_2)]^{\frac{1}{2}}\\ &\cdot V\begin{pmatrix}\tau_1 & \tau_2 & \Gamma_3\\ r_1 & r_2 & \bar{\alpha}_1\end{pmatrix}^* V\begin{pmatrix}\tau_1' & \tau_2' & \Gamma_2\\ r_1' & r_2' & \bar{\alpha}_2'\end{pmatrix} V\begin{pmatrix}\pi_1 & \pi_2 & \pi\\ q_1 & q_2 & \bar{\rho}\end{pmatrix}^* \langle \Psi_{r_1}^{\tau_1}\Psi_{r_2}^{\tau_2} \mid \hat{T}_{q_1}^{(\pi_1)}\hat{V}_{q_2}^{(\pi_2)} \mid \Psi_{r_1'}^{\tau_1'}\Psi_{r_2'}^{\tau_2'}\rangle\\ &=\sum_{r_1r_2}\sum_{r_1'r_2'}\sum_{q_1q_2}[-1]^{\Gamma_1+\Gamma_2-\alpha_1+2\Gamma_2+\Gamma_2-\alpha_2+2\pi+\pi-\rho}[\lambda(\pi)\lambda(\Gamma_1)\lambda(\Gamma_2)]^{\frac{1}{2}}V\begin{pmatrix}\tau_1 & \tau_2 & \Gamma_1\\ r_1 & r_2 & \bar{\alpha}_1\end{pmatrix}^*\\ &\cdot V\begin{pmatrix}\tau_1' & \tau_2' & \Gamma_2\\ r_1' & r_2' & \bar{\alpha}_2\end{pmatrix} V\begin{pmatrix}\pi_1 & \pi_2 & \pi\\ q_1 & q_2 & \bar{\rho}\end{pmatrix}(-1)^{\pi_1-q_1+\pi_2-q_2}V\begin{pmatrix}\tau_1 & \tau_1' & \pi_1\\ \bar{r}_1' & r_1' & q_1\end{pmatrix}^*\\ &\cdot V\begin{pmatrix}\tau_2 & \tau_2' & \pi_2\\ \bar{r}_2' & r_2' & q_2\end{pmatrix}^* \langle \Psi^{(\tau_1)}\Psi^{(\tau_2)} \,\|\, \hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)} \,\|\, \Psi^{(\tau_1')}\Psi^{(\tau_2')}\rangle\end{aligned} \tag{3.12.17}$$

把(3.12.16)式和(3.12.17)相等起来，两端乘

$$(-1)^{\Gamma_1-\alpha_1}V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \pi\\ \bar{\alpha}_1 & \alpha_2 & \rho\end{pmatrix}^*$$

并对 α_1，α_2 求和，可得到

$$
\begin{aligned}
&\langle \Psi^{(\Gamma_1)}(\tau_1\tau_2) \parallel [\hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)}]^{\pi} \parallel \Psi^{(\Gamma_2)}(\tau_1'\tau_2')\rangle \\
&= \sum_{r_1r_2}\sum_{r_1'r_2'}\sum_{q_1q_2}\sum_{\alpha_1\alpha_2}[-1]^{2\Gamma_1+\Gamma_1-\alpha_1+2\Gamma_2+2\Gamma_2-\alpha_2+2\pi+\pi-\rho+\Gamma_1-\alpha_1+\pi_1-q_1+\pi_2-q_2+\Gamma_1-\alpha_1} \\
&\cdot\sqrt{\lambda(\Gamma_1)\lambda(\Gamma_2)\lambda(\pi)} \\
&\cdot V\begin{pmatrix}\tau_1 & \tau_2 & \Gamma_1\\ r_1 & r_1' & \bar{\alpha}_1\end{pmatrix}^* V\begin{pmatrix}\tau_1' & \tau_2' & \Gamma_2\\ r_1' & r_2' & \bar{\alpha}_2\end{pmatrix} V\begin{pmatrix}\pi_1 & \pi_2 & \pi\\ q_1 & q_2 & \bar{\rho}\end{pmatrix} \\
&\cdot V\begin{pmatrix}\tau_1 & \tau_1' & \pi_1\\ \bar{r}_1 & r_1' & q_1\end{pmatrix}^* V\begin{pmatrix}\tau_2 & \tau_2' & \pi_2\\ \bar{r}_2 & r_2' & q_2\end{pmatrix}^* V\begin{pmatrix}\tau_1 & \Gamma_2 & \pi\\ \bar{\alpha}_1 & \alpha_2 & \rho\end{pmatrix} \\
&\cdot\langle \Psi^{\tau_1}\Psi^{\tau_2}\hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_1)} \parallel \Psi^{(\tau_1')}\Psi^{(\tau_2')}\rangle \\
&= \sqrt{\lambda(\Gamma_1)\lambda(\Gamma_2)\lambda(\pi)}\,X\begin{pmatrix}\tau_1 & \tau_2' & \pi_1\\ \tau_2 & \tau_2' & \pi_2\\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \pi\end{pmatrix}\langle \Psi^{\tau_1}\Psi^{\tau_2} \parallel \hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)} \parallel \Psi^{(\tau_1')}\Psi^{(\tau_2')}\rangle
\end{aligned}
\tag{3.12.18}
$$

其中出现的 X-系数的定义，与 $SO(3)$ 群的 9-j 符号相类似，详细情况可参阅唐敖庆等著《配位场理论方法》.

于是耦合张量算子的 W-E 定理可直接写为

$$
\begin{aligned}
&\langle \Psi(\tau_1\tau_2)^{\Gamma_1}_{\alpha_1} \mid [\hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)}]^{\pi}_{q} \mid \Psi(\tau_1'\tau_2')^{\Gamma_2}_{\alpha_2}\rangle \\
&= \sqrt{\lambda(\Gamma_1)\lambda(\Gamma_2)\lambda(\pi)}[-1]^{\Gamma_1-\alpha_1} V\begin{pmatrix}\Gamma_1 & \Gamma_2 & \pi\\ \bar{\alpha}_1 & \alpha_2 & \rho\end{pmatrix}^* \\
&\quad X\begin{pmatrix}\tau_1 & \tau_1' & \pi_1\\ \tau_2 & \tau_2' & \pi_2\\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \pi\end{pmatrix}\langle \Psi^{\tau_1}\Psi^{\tau_2} \parallel \hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)} \parallel \Psi^{(\tau_1')}\Psi^{(\tau_2')}\rangle
\end{aligned}
\tag{3.12.19}
$$

在上述各式中均未包括重复出现的情况，如有重复出现应加重复出现脚标并求和. 而且上面公式只适用 A 和 B 类不可约表示，对 C 类表示要相应注意 Γ^* 与 Γ 不同，此时相应的公式变为

$$
\begin{aligned}
&\langle \Psi(\tau_1\tau_2)^{(\Gamma_1)}_{\alpha_1} \mid [\hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)}]^{\pi}_{q} \mid \Psi(\tau_1'\tau_2')^{\Gamma_2}_{\alpha_2}\rangle \\
&= \sqrt{\lambda(\Gamma_1)\lambda(\Gamma_2)\lambda(\pi)}[-1]^{\Gamma_1-\alpha_1} V\begin{pmatrix}\Gamma_1{}^* & \Gamma_2 & \pi^*\\ \bar{\alpha}_1 & \alpha_2 & q\end{pmatrix} \\
&\quad X\begin{pmatrix}\tau_1{}^* & \tau_1' & \pi_1{}^*\\ \tau_1{}^* & \tau_2' & \pi_2{}^*\\ \Gamma_1{}^* & \Gamma_2 & \pi^*\end{pmatrix}\langle \Psi^{(\tau_1)}\Psi^{(\tau_2)} \parallel \hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_2)} \parallel \Psi^{(\tau_1')}\Psi^{(\tau_2')}\rangle
\end{aligned}
\tag{3.12.19'}
$$

很多情况下

$$[\hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_1)}]^{A_1}_a = \sum_{\rho_1\rho_2}(\pi_1\rho_1, \pi_2\rho_2 \mid A_1 a)\hat{T}^{(\pi_1)}_{\rho_1}\hat{V}^{(\pi_1)}_{\rho_2}$$

由于

$$(\pi_1\rho_1, \pi_2\rho_2 \mid A_1 a) = \frac{1}{\sqrt{\lambda(\pi_1)}}[-1]^{\pi_1+\rho_1}\delta_{\pi_1\pi_2}\delta_{\rho_1\rho_2}$$

因而通常表示为

$$\sqrt{\lambda(\pi_1)}[\hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_1)}]^{A_1}_a = \sum_{\rho}[-1]^{\pi_1-\rho}\hat{T}^{(\pi_1)}_{\rho}\hat{V}^{(\pi_1)}_{\bar{\rho}} = \hat{T}^{(\pi_1)}\cdot\hat{V}^{(\pi_1)}$$

在这种情况下

$$\begin{aligned}
&\langle\Psi(\tau_1\tau_2)^{\Gamma_1}_{\alpha_1} \mid \hat{T}^{(\pi)}\cdot\hat{V}^{(\pi)} \mid \Psi(\tau_1'\tau_2')^{\Gamma_2}_{\alpha_2}\rangle \\
&= \delta_{\Gamma_1\Gamma_2}\delta_{\alpha_1\alpha_2}[-1]^{\Gamma_1'+\Gamma_2'+\pi+\Gamma_1} W\begin{pmatrix} \tau_1{}^* & \tau_1' & \pi^* \\ \tau_2' & \tau_2 & \Gamma_1 \end{pmatrix} \\
&\cdot\langle\Psi^{(\tau_1)}\Psi^{(\tau_2)} \parallel \hat{T}^{(\pi_1)}\hat{V}^{(\pi_1)} \parallel \Psi^{(\tau_1')}\Psi^{(\tau_2')}\rangle
\end{aligned} \tag{3.12.20}$$

式中利用了

$$V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & A_1 \\ \bar{\alpha}_1 & \alpha_2 & a \end{pmatrix} = \delta_{\Gamma_1\Gamma_2}\delta_{\alpha_1\bar{\alpha}_2}\frac{1}{\sqrt{\lambda(\Gamma_1)}}[-1]^{\tau_1+\alpha_1}$$

和

$$X\begin{pmatrix} \tau_1{}^* & \tau_1' & \pi_1{}^* \\ \tau_2{}^* & \tau_2' & \pi_1{}^* \\ \Gamma_1{}^* & \Gamma_1 & A_1 \end{pmatrix} = W\begin{pmatrix} \tau_1{}^* & \tau_1' & \pi^* \\ \tau_2' & \tau_2 & \Gamma_1 \end{pmatrix}$$

点群 G 的各种 W-E 定理与 $SO(3)$ 的相应定理是完全平行的，只是把 3-j 符号换成了 V-系数；把 9-j 符号换成了 X-系数；把 6-j 符号换成了 W-系数，只须注意在点群下的时间反演相因子$[-1]^{\Gamma-\gamma}$和重复出现须附加一定脚标的问题.

第四章　点群表示理论在分子结构中的应用

分子是由若干原子核和电子构成的一个稳定的量子体系，在理论上处理这类多粒子体系需要量子力学知识. 1927 年 M. Heitler 和 F. London 用量子力学研究氢分子，开创了利用量子力学研究分子结构的先河，后来逐步发展成了理论化学中的一个重要分枝学科——量子化学.

分子是由原子核与原子核间的相互作用，原子核与电子间的相互作用以及电子与电子间的相互作用而形成的稳定体系. 由于原子核质量比电子质量大得多，作为初级近似，可忽略原子核在它的平衡位置附近的运动，而认为它们是不动的，形成了分子的固定骨架. 这种分子骨架有一定的对称性，这种对称性可由一定的点群来描述. 由于固定骨架的对称性必定制约了形成分子的电子的运动，因而点群对于研究分子结构是一种十分有用的数学工具.

从量子力学来看，分子结构的问题归之于求解一定结构的 Schrodinger 方程. 分子结构的点群对称性必然导致 Schrodinger 方程的特定对称性. 而物理体系的对称性，反映在描述这个体系的 Schrodinger 方程的对称性上，因而群表示理论与量子力学之间存在着密切的关系. 从而在本章中首先讨论群表示理论与量子力学中 Schrodinger 方程的一般关系，然后再研究若干点群表示理论与分子结构问题之间的密切联系.

4.1　Schrodinger 方程及其对称群

在量子力学中，一切物理量都用一定的厄米算子描述，所谓厄米算子 $\hat{P}$，就是这个算子的厄米共轭 $\hat{P}^+$ 等于它自身，即

$$\hat{P}=\hat{P}^+ \tag{4.1.1}$$

量子体系的定态 Schrodinger 方程为

$$\hat{H}\Psi_n=E_n\Psi_n,\quad n=1,2,\cdots \tag{4.1.2}$$

其中算子 $\hat{H}$ 为 Hamilton 算子，它在物理上描述体系的总能量，E_n 为实数，即能量本征值，本征向量 Ψ_n 为体系的波函数. 通常体系的能量本征值是简并的，即同一个能量本征值 E_n，也可对应几个本征向量 Ψ_n，为了区别这些本征向量，引入一个量子数 λ，把同一本征值 E_n 的不同本征函数记为 $\Psi_{n\lambda}$，于是方程(4.1.2)可写为

$$\hat{H}\Psi_{n\lambda}=E_n\Psi_{n\lambda},\quad \lambda=1,3,\cdots,l \tag{4.1.3}$$

l 称为能量本征值 E_n 的简并度.

Schrodinger 方程(4.1.3)是建立在 Hilbert 空间上的，Hilbert 空间是完备的内积空间，是无限维的空间. 内积的定义为

$$(f, g) = \int_{\tau} f^* g \mathrm{d}\tau \tag{4.1.4}$$

其中f, g是 Hilbert 空间中的任意两个元素，一般称为 Hilbert 空间的向量，积分区域是函数f和g的定义域. 但是作为近似，所有的具体物理问题都是在 Hilbert 空间的一个有限维子空间(称为模型空间)内进行求解. 求解 Schrodinger 方程，在这个有限维的子空间中，如果选定一组基矢(e_1, e_2, …, e_n)，则 Hamilton 算子表现为$n \times n$的厄米矩阵.

对于作用在 Hilbert 空间的n维子空间(即n维内积空间或n维酉空间)的任意算子$\hat{P}$，在这个空间上的表示为$n \times n$的矩阵. 若用算子$\hat{P}$作用于基矢e_i得到一个f_i，它也是这个n维内积空间中的一个向量，必然可由基矢(e_1, e_2, …, e_n)的线性组合表示，即

$$\hat{P} e_i = \sum_j P_{ij} e_j$$

由此就得到了$n \times n$的矩阵

$$\bar{P} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ P_{n1} & P_{n2} & \cdots & P_{nn} \end{pmatrix}$$

因而$\bar{P}$为算子$\hat{P}$的表示矩阵.

描述物理量的厄米算子，在n维内积空间为$n \times n$的厄米矩阵所表示. 即

$$\bar{P}^+ = \begin{pmatrix} P_{11}^* & P_{21}^* & \cdots & P_{n1}^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ P_{1n}^* & P_{2n}^* & \cdots & P_{nn}^* \end{pmatrix} = \bar{P}, \quad P_{ij}^+ = P_{ji}^* \tag{4.1.5}$$

下面证明有关厄米算子的一条定理.

定理 4.1.1 厄米算子的本征值为实数，不同本征值的本征向量相互正交.

证明 设算子$\hat{P}$是厄米算子，即$\hat{P} = \hat{P}^+$，本征方程为

$$\hat{P} \Psi_{nk} = \lambda_n \Psi_{nk} \tag{4.1.6}$$

它与$\Psi_{n'k'}$的内积，按内积定义为

$$(\hat{P} \Psi_{nk}, \Psi_{n'k'}) = (\lambda_n \Psi_{nk}, \Psi_{n'k'}) = \lambda_n^* (\Psi_{nk}, \Psi_{n'k'}) \tag{4.1.7}$$

取$\Psi_{n'k'} = \Psi_{nk}$，则本征值λ_n为

$$\lambda_n^* = \frac{(\hat{P} \Psi_{nk}, \Psi_{nk})}{(\Psi_{nk}, \Psi_{nk})} \tag{4.1.8}$$

取内积

$$(\Psi_{nk}, \hat{P} \Psi_{nk}) = (\Psi_{nk}, \lambda_n \Psi_{nk}) = \lambda_n (\Psi_{nk}, \Psi_{nk})$$

即

$$\lambda_n = \frac{(\Psi_{nk}, \hat{P} \Psi_{nk})}{(\Psi_{nk}, \Psi_{nk})} \tag{4.1.9}$$

然而

$$(\Psi_{nk}, \hat{P} \Psi_{nk}) = (\hat{P} \Psi_{nk}, \Psi_{nk})^*$$

这就证明了

$$\lambda_n = \frac{(\hat{P}\Psi_{nk}, \Psi_{nk})^*}{(\Psi_{nk}, \Psi_{nk})} = \lambda_n^* \tag{4.1.10}$$

即本征值 λ_n 为实数.

取 $\Psi_{n'k'}$不等于 Ψ_{nk}，而是另一个本征值 $\lambda_{n'}$的本征向量($\lambda_n \neq \lambda_{n'}$). 由于 $\hat{P}$ 是厄米算子，则(4.1.7)式左端

$$(\hat{P}\Psi_{nk}, \Psi_{n'k'}) = (\Psi_{nk}, \hat{P}\Psi_{n'k'}) = \lambda_{n'}(\Psi_{nk}, \Psi_{n'k'}) \tag{4.1.11}$$

于是由(4.1.7)式和(4.1.11)式得到

$$(\lambda_n - \lambda_{n'})(\Psi_{nk}, \Psi_{n'k'}) = 0$$

因为 $\lambda_n \neq \lambda_{n'}$，必然要求

$$(\Psi_{nk}, \Psi_{n'k'}) = 0 \tag{4.1.12}$$

从而 Ψ_{nk}，$\Psi_{n'k'}$相互正交，这就证明了这个定理.

由这个定理得到 Schrodinger 方程(4.1.3)不同本征值的本征向量是正交的. 同一本征值的 k 个简并的本征向量，也可正交化(如用 Schmit 方法把它们正交化). 于是 Schrodinger 方程(以及所有厄米算子的本征方程)的全部本征向量都相互正交，而且归一化的. 如 Ψ_n 是非归一化的，令

$$\varphi_n = \frac{\Psi_n}{(\Psi_n, \Psi_n)}$$

则

$$(\varphi_n, \varphi_n) = \frac{1}{(\Psi_n, \Psi_n)}(\Psi_n, \Psi_n) = 1$$

在第一章中已指出对于正交归一化基矢(e_1, e_2, …, e_n)作用于这个空间上的所有线性变换算子 $\hat{P}$ 的表示矩阵都是酉矩阵.

三维实空间中的线性变换群 G，群元素为 g，它在 n - 维酉空间的表示为 $n \times n$ 的酉矩阵 $\hat{P}(g)$(前面曾记为 $\tilde{P}$，现在及以后，不再区分算子 $\hat{P}$ 和表示矩阵 $\tilde{P}$). 如果它们和 Hamilton 算子 $\hat{H}$ 对易，即

$$\hat{H} \cdot \hat{P}(g) = \hat{P}(g) \cdot \hat{H}$$

或

$$\hat{P}(g) \cdot \hat{H} \cdot \hat{P}^{-1}(g) = \hat{H}, \quad g \in G \tag{4.1.13}$$

则称 Hamilton 算子 $\hat{H}$ 具有群 G 的对称性或者说群 G 是 Hamilton 算子的对称群.

容易看到，对 Schrodinger 方程(4.1.3)有

$$\hat{P}(g) \cdot \hat{H}\Psi_{n\lambda} = \hat{H} \cdot \hat{P}(g)\Psi_{n\lambda} = E_n\hat{P}(g)\Psi_{n\lambda} \tag{4.1.14}$$

这表明若 $\Psi_{n\lambda}$是 $\hat{H}$ 的本征值为 E_n 的本征向量，则 $\hat{P}(g)\Psi_{n\lambda}$也是 $\hat{H}$ 的本征值为 E_n 的本征向量.

由此可得到下面重要的结论：

(1) 若 Hamilton 算子具有群 G 的对称性，它的某个本征值 E_n 是非简并的，则本征

函数 Ψ_n 一定是群 G 的一维不可约表示的基函数. 因为 $\hat{P}(g)\Psi_n$ 仍然是本征值为 E_n 的本征向量，而非简并的本征向量只能相差一个相因子，即

$$\hat{P}(g)\Psi_n = e^{i\alpha_n}\Psi_n$$

这恰是群 G 的一维表示.

(2) 若本征值是简并的，简并度为 l，则 l 个本征向量 $\Psi_{n\lambda}(\lambda=1, 2, \cdots, l)$ 构成群 G 的 l 维表示的基函数. 因为本征值 E_n 的 l 个简并的本征向量的任意线性组合仍然是本征值 E_n 的本征向量，即

$$\hat{P}(g)\Psi_{n\lambda} = \sum_{i=1}^{l} A_{i\lambda}^{(n)}(g)\Psi_{n_i}$$

$A_{i\lambda}^{(n)}(g)$ 是群 G 的 l 维表示矩阵.

这个 l 维的表示可能是不可约的，也可能是可约的. 若是可约的，则 l 维的子空间还包括若干个群 G 的不变子空间，每个子空间荷载群 G 的一个不可约表示.

如氢原子的 Schrodinger 方程就是说明这一问题的例证. 当无自旋作用时，氢原子的定态 Schrodinger 方程为

$$\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r}) = E_n\Psi(r), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}$$

本征值为

$$E_n = -\frac{R}{n^2}, \quad n=1, 2, \cdots \quad (R\text{ 为常数})$$

本征向量为

$$Y_{nlm}(r, \theta, \psi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \psi)$$

因为氢原子具有 $SO(3)$ 群的对称性，它的本征向量是简并的，同一本征值 E_n 的简并本征向量构成 $SO(3)$ 群表示的基函数. $SO(3)$ 群不可约表示由 l 描述，以 l 描述的不可约表示的维数为 $2l+1$，它的分量用 m 描述. 对一定 l，$m=-l, -l+1, \cdots, 0, 1, \cdots, l$. 因而前面给出的同一能量本征值 E_n 的简并本征向量包括 $l=n-1, n-2, \cdots, 0$，它的简并度为

$$n^2 = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)$$

这 n^2 个简并本征矢量荷载了 n 个 $SO(3)$ 群的不可约表示 $l=0, l=1, \cdots, l=n-1$. 函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 是 $SO(3)$ 群不可约表示 (l) 的基矢.

从本质上看本征值的简并起源于对称性，因而可用对称群的不可约表示标记本征值，这种简并称为固有简并. 像氢原子同一本征值包括多种 $SO(3)$ 群的不可约表示 l 的简并，通常称为偶然简并. 一般来讲，这种简并的背后还有尚未发现的对称性，关于氢原子能级的偶然简并问题本书第十四章将进一步讨论.

Schrodinger 方程(4.1.3)只对氢原子或谐振子等最简单体系才存在解析解，而对多粒子体系根本无解析解，通常是根据具体物理体系选择一定 Hilbert 空间的有限维子空间 $L^{(n)}$(即模型空间)寻求近似解. 在 n 维模型空间上，选取一组正交归一化基矢 $(f_1, f_2, \cdots, f_n)$. 这时本征向量为模型空间的一个向量，在这组基矢下它可表示为

$$\Psi_{n\lambda} = \sum_{i=1}^{n} a_{\lambda i}^{(n)} f_i \tag{4.1.15}$$

于是方程(4.1.3)变为

$$\hat{H}\Psi_{n\lambda} = \sum_{i=1}^{n} a_{\lambda i}^{(n)} \hat{H} f_i = E_n \sum_{i=1}^{n} a_{\lambda i}^{(n)} f_i$$

计算上式与f_j的内积，得到

$$\begin{aligned}(f_j,\ \hat{H}\Psi_{n\lambda}) &= \sum_{i=1}^{n} a_{\lambda i}^{(n)} (f_j,\ \hat{H} f_i) \\ &= E_n \sum_{i=1}^{n} a_{\lambda i}^{(n)} (f_j, f_i) = a_{\lambda j}^{(n)} E_n\end{aligned} \tag{4.1.16}$$

其中$(f_j,\ \hat{H}f_i)$为 Hamilton 算子在模型空间上的表示矩阵的矩阵元，一般记为

$$(f_j,\ \hat{H}f_i) = \int_v f_j^* \hat{H} f_i \mathrm{d}c = \langle j \mid H \mid i \rangle$$

Hamilton 矩阵为

$$\hat{H} = [\langle j|H|i\rangle] \tag{4.1.17}$$

这样求解微分方程(4.1.3)的问题在选定模型空间下变成了求解线性齐次方程组(4.1.16)的问题，即

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} a_{1i}^{(n)} [\langle 1 \mid H \mid i \rangle - \delta_{i1} E_n] = 0 \\ \sum_{i=1}^{n} a_{2i}^{(n)} [\langle 2 \mid H \mid i \rangle - \delta_{i2} E_n] = 0 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \sum_{i=1}^{n} a_{ni}^{(n)} [\langle n \mid H \mid i \rangle - \delta_{in} E_n] = 0 \end{cases} \tag{4.1.18}$$

由线性齐次方程的克拉姆定理，线性齐次方程组有解的充要条件是系数行列式为0，即

$$\det|\hat{H} - E_n\hat{E}| = 0 \tag{4.1.19}$$

其中 $\hat{E}$ 为 n 维空间的单位矩阵. 方程(4.1.19)称为本征方程或久期方程，由它决定本征值 E_n，然后代入方程(4.1.18)，再求出系数 $a_{\lambda i}^{(n)}$，就得到了本征向量.

如果体系具有某个群 G 的对称性，可以首先把模型空间作为群 G 的表示空间，建立群 G 的 n 维的表示 $D^{(n)}$. 它通常是可约的，把它约化为不可约化表示的直和，即

$$D^{(n)} = \sum_i \oplus a_i \Gamma_i, \quad n = \sum_i a_i \lambda(\Gamma_i)$$

$D^{(n)}$为在模型空间 $L^{(n)}$ 上建立的群 G 的表示，Γ_i 为群 G 的第 i 个不可约表示，$\lambda(\Gamma_i)$为不可约表示 Γ_i 的维数，a_i 为不可约表示 Γ_i 在 $D^{(n)}$ 中出现的重复度. 第 k 个重复出现的不可约表示 Γ_i^k 的基矢为

$$\{\Psi_j^{\Gamma_i^{(k)}} \mid j = 1, 2, \cdots, \lambda(\Gamma_i)\} \quad (k = 1, 2, \cdots, a_i)$$

于是空间 $L^{(n)}$ 的全部基函数为

$$\{\Psi_j^{\Gamma_i^{(k)}} | j=1, 2, \cdots, \lambda(\Gamma_i);\ k=1, 2, \cdots, a_i;\ i=1, 2, \cdots, l\}$$

它们都以对称群 G 的不可约表示标记.

根据不可约表示基矢的正交性，不同不可约表示的基矢是相互正交的，同一不可约表示的不同基矢是正交的，因而这些不可约表示基矢具有如下性质：

$$(\Psi_j^{\Gamma_i^{(k)}}, \Psi_{j'}^{\Gamma_{i'}^{(k')}}) = \delta_{\Gamma_i\Gamma_{i'}}\delta_{jj'}(\Psi_j^{\Gamma_i^{(k)}}, \Psi_j^{\Gamma_i^{(k')}}) \tag{4.1.20}$$

如果用某种方法把模型空间 $L^{(n)}$ 分解为群 G 的不可约表示的直和空间，找到了群 G 的全部不可约表示的基矢

$$\{\Psi_j^{\Gamma_i^{(k)}} \mid i = 1, 2, \cdots, l; k = 1, 2, \cdots, a_i; j = 1, 2, \cdots, \lambda(\Gamma_i)\}$$

在这组基矢中求解 Schrodinger 方程(4.1.3)将十分简单. 即

$$\hat{H}\Psi_j^{\Gamma_i^{(k)}} = E(\Gamma_i^{(k)})\Psi_j^{\Gamma_i^{(k)}}$$

本征值以不可约表示 $\Gamma_i^{(k)}$ 来标记. 如果存在偶然简并，则若干 $E(\Gamma_i^{(k)})$ 相同.

一般来讲，在对称群 G 的不可约表示基函数构成的基矢中，Hamilton 的矩阵元具有性质：

$$(\Psi_k^{\Gamma_i^{(\alpha)}}, \hat{H}\Psi_l^{\Gamma_j^{(\beta)}}) = \delta_{\Gamma_i,\Gamma_j}\delta_{k,l}(\Psi_k^{\Gamma_i^{(\alpha)}}, \hat{H}\Psi_l^{\Gamma_j^{(\beta)}}) \tag{4.1.21}$$

即 Hamilton 矩阵是准对角化的，只有相同不可约表示的基函数间才有非零的矩阵元，因而将大大简化求解本征方程(4.1.18)的工作. 这是群论在量子力学中应用的一个重要方面.

4.2 投影算子与对称性匹配基矢

如果 n 维模型空间 $L^{(n)}$ 的基矢为$(f_1, f_2, \cdots, f_n)$，这个空间可约化为 Hamilton 算子的对称群 G 的不可约表示空间的直和，即

$$L^{(n)} = \sum_i \oplus L^{(\Gamma_i)} \tag{4.2.1}$$

其中 $L^{(\Gamma_i)}$ 为群 G 的不可约表示 Γ_i 的表示空间. 若不可约表示在约化中重复出现，则(4.2.1)式变为

$$L^{(n)} = \sum_{i,k} \oplus L^{(\Gamma_i^k)} \tag{4.2.2}$$

空间维数 n 为

$$n = \sum_i a_i\lambda(\Gamma_i) \tag{4.2.3}$$

a_i 为不可约表示 Γ_i 出现的重复度，$k = 1, 2, \cdots, a_i$. 于是在空间 $L^{(n)}$ 中得到一组以群 G 不可约表示标记的基矢.

$$\{\Psi_j^{(\Gamma_i^k)} \mid j = 1, 2, \cdots, \lambda(\Gamma_i); k = 1, 2, \cdots, a_i; i = 1, 2, \cdots, l\}$$

l 为群 G 不可约表示的数目. 称这组基矢为对称性匹配的基矢. 它们是基矢$(f_1, f_2, \cdots, f_n)$的线性组合. 这两组基矢由一个矩阵相互变换.

4.2.1 投影算子

定义 称如下的算子为群 G 的投影算子，即

$$\hat{P}_{ij}^{(\Gamma)} = \frac{\lambda(\Gamma)}{N}\sum_{g\in G} D^{(\Gamma)}(g)_{ij}^{*}\hat{P}(g) \tag{4.2.4}$$

或对角元投影算子

$$\hat{P}_{ii}^{(\Gamma)} = \frac{\lambda(\Gamma)}{N}\sum_{g\in G} D^{(\Gamma)}(g)_{ii}^{*}\hat{P}(g) \tag{4.2.4'}$$

其中 $D^{(\Gamma)}(g)$ 为群 G 元素 g 的不可约表示 Γ 的表示矩阵，$\hat{P}(g)$ 为群 G 作用于空间 $L^{(n)}$ 上的算子，N 为群 G 的阶.

下面讨论投影算子 $\hat{P}_{ij}^{(\Gamma)}$ 的性质.

1. 投影算子本身的性质

投影算子 $(\hat{P}_{ii}^{(\Gamma)})^2 = \hat{P}_{ii}^{(\Gamma)}$，这是投影算子的基本性质，由定义可以证明这一点，即

$$(\hat{P}_{ii}^{(\Gamma)})^2 = \frac{\lambda(\Gamma)^2}{N^2}\sum_{g\in G}\sum_{g'\in G} D^{(\Gamma)}(g)_{ii}^{*} D^{(\Gamma)}(g')_{ii}^{*}\hat{P}(g)\hat{P}(g')$$

而算子之积为

$$\hat{P}(g)\cdot\hat{P}(g') = \hat{P}(g\cdot g') = \hat{P}(g'')$$
$$g'' = g\cdot g'$$
$$g' = g^{-1}\cdot g''$$

因而上式变为

$$(\hat{P}_{ii}^{(\Gamma)})^2 = \frac{\lambda(\Gamma)^2}{N^2}\sum_{g\in G}\sum_{g''\in G} D^{(\Gamma)}(g)_{ii}^{*} D^{(\Gamma)}(g^{-1}\cdot g'')_{ii}^{*}\hat{P}(g'')$$

而

$$\begin{aligned} D^{(\Gamma)}(g^{-1}\cdot g'')_{ii}^{*} &= [D^{(\Gamma)}(g^{-1})\cdot D^{(\Gamma)}(g'')]_{ii}^{*} \\ &= \sum_{k} D^{(\Gamma)}(g)_{ki} D^{(\Gamma)}(g'')_{ki}^{*} \end{aligned}$$

把此式代入上式，利用不可约表示的广义正交定理得到

$$\begin{aligned} (\hat{P}_{ii}^{(\Gamma)})^2 &= \frac{\lambda(\Gamma)}{N}\sum_{g''\in G}\sum_{k}\frac{\lambda(\Gamma)}{N}\Big[\sum_{g\in G} D^{(\Gamma)}(g)_{ii}^{*} D^{(\Gamma)}(g)_{ki}\Big] D^{(\Gamma)}(g'')_{ki}^{*}\hat{P}(g'') \\ &= \frac{\lambda(\Gamma)}{N}\sum_{g''\in G}\sum_{k}\delta_{ik} D^{(\Gamma)}(g'')_{ki}^{*}\hat{P}(g'') \\ &= \hat{P}_{ii}^{(\Gamma)} \end{aligned} \tag{4.2.5}$$

利用类似的方法可证明

$$\hat{P}_{ii}^{(\Gamma)}\hat{P}_{jj}^{(\Gamma')} = 0 \qquad (\Gamma\neq\Gamma') \tag{4.2.6}$$

即不同不可约表示的投影算子是相互正交的.

2. 投影算子作用于任意函数的性质

空间 $L^{(n)}$ 中任意矢量 ψ，都可展开为对称性匹配的基矢的线性组合，即

$$\psi = \sum_{\Gamma_i^{\dagger},\alpha_i} a_{\alpha_i}^{(\Gamma_i^{\dagger})}\Psi_{\alpha_i}^{(\Gamma_i^{\dagger})} \tag{4.2.7}$$

以投影算子 $\hat{P}_{jj}^{(\Gamma)}$ 作用于 ψ，得到

$$\begin{aligned}\hat{P}_{jj}^{(\Gamma)}\psi &= \sum_{\Gamma_i^k,\alpha_i} a_{\alpha_i}^{(\Gamma_i^k)} \hat{P}_{jj}^{(\Gamma)} \Psi_{\alpha_i}^{(\Gamma_i^k)} \\ &= \sum_{\Gamma_i^k,\alpha_i} a_{\alpha_i}^{(\Gamma_i^k)} \frac{\lambda(\Gamma)}{N} \sum_{g\in G} D^{(\Gamma)}(g)_{jj}^* \hat{P}(g) \Psi_{\alpha_i}^{(\Gamma_i^k)} \\ &= \sum_{\Gamma_i^k,\alpha_i} a_{\alpha_i}^{(\Gamma_i^k)} \frac{\lambda(\Gamma)}{N} \sum_{g\in G} D^{(\Gamma)}(g)_{jj}^* \sum_{\beta} D^{(\Gamma_i^k)}(g)_{\beta\alpha_i} \Psi_{\beta}^{(\Gamma_i^k)}\end{aligned}$$

由不可约表示的广义正交定理，

$$\frac{\lambda(\Gamma)}{N} \sum_{g\in G} D^{(\Gamma)}(g)_{jj}^* D^{(\Gamma_i^k)}(g)_{\beta\alpha_i} = \delta_{\Gamma,\Gamma_i^k} \delta_{j\beta} \delta_{j\alpha_i}$$

于是

$$\hat{P}_{jj}^{(\Gamma)}\psi = \sum_k a_j^{(\Gamma_i^k)} \Psi_j^{(\Gamma_i^k)} \tag{4.2.8}$$

(4.2.8)式说明：

(1) 若不可约表示 Γ 在 $L^{(n)}$ 空间中没有重复出现，即 $a^{(\Gamma)}=1$，则 $P_{jj}^{(\Gamma)}$ 作用于空间 $L^{(n)}$ 中的任意向量 ψ，得到 ψ 中所含 $\Psi_{j'}^{(\Gamma)}$ 的成分，即从 ψ 中投影出 $\Psi_{j'}^{(\Gamma)}$；

(2) 若不可约表示 Γ 是重复出现的，$\hat{P}_{jj}^{(\Gamma)}$ 作用于任意向量 ψ，则从中投影出所有重复出现的 Γ 的成分 $\sum_k a_j^{(\Gamma^k)} \Psi_{j'}^{(\Gamma^k)}$.

这正是称算子 $\hat{P}_{jj}^{(\Gamma)}$ 为投影算子的原因.

如果构造出投影算子 $\hat{P}_{jj}^{(\Gamma)}$，就可容易利用这些算子从 $L^{(n)}$ 的向量中投影出对称性匹配的基矢，投影算子是寻求对称性匹配基矢的有力工具.

从(4.2.4)式可看到定义投影算子需要群 G 的表示矩阵，因而构造投影算子比较麻烦. 但是可定义一种不完全的投影算子，即令

$$\hat{P}^{(\Gamma)} = \sum_k \hat{P}_{kk}^{(\Gamma)} = \frac{\lambda(\Gamma)}{N} \sum_{g\in G} \chi^{(\Gamma)*}(g) \hat{P}(g) \tag{4.2.9}$$

称 $\hat{P}^{(\Gamma)}$ 为不完全的投影算子，又称特征标投影算子.

把 $\hat{P}^{(\Gamma)}$ 作用于任意向量 ψ 得到

$$\begin{aligned}\hat{P}^{(\Gamma)}\psi &= \sum_{\Gamma_i^k j} a_j^{(\Gamma_i^k)} \hat{P}^{(\Gamma)} \Psi_j^{(\Gamma_i^k)} \\ &= \frac{\lambda(\Gamma)}{N} \sum_{\Gamma_i^k j} a_j^{(\Gamma_i^k)} \sum_{g\in G} \chi^{(\Gamma)*}(g) \hat{P}(g) \Psi_j^{(\Gamma_i^k)} \\ &= \frac{\lambda(\Gamma)}{N} \sum_{\Gamma_i^k j} a_j^{(\Gamma_i^k)} \sum_{g\in G} \chi^{(\Gamma)*}(g) \sum_k D^{(\Gamma_i^k)}(g)_{kj} \Psi_j^{(\Gamma_i^k)}\end{aligned}$$

由于

$$\frac{\lambda(\Gamma)}{N} \sum_{g\in G} \chi^{(\Gamma)*}(g) D^{(\Gamma_i^k)}(g)_{kj} = \delta_{\Gamma\Gamma_i^k} \delta_{kj}$$

因而

$$\hat{P}^{(\Gamma)}\psi = \sum_{k,j} a_j^{(\Gamma^k)} \Psi_j^{(\Gamma^k)} \tag{4.2.10}$$

这说明不完全的投影算子 $\hat{P}^{(\Gamma)}$ 可从任意向量 ψ 中投影出不可约表示基矢 $\Psi_j^{(\Gamma^k)}$ 的线性组合，然后再利用完全的投影算子求出不可约表示的基矢.

下面给出在二次齐次函数空间(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz)中利用群 G 的投影算子构造对称性匹配基矢的两个例子.

4.2.2　D_4 群的投影算子与对称性匹配的基矢

在第三章中已给出 D_4 群的五个不可约表示的表示矩阵. 它们列于下表中.

D_4 群不可约表示矩阵

D_4	E	C_4	C_4^2	C_4^3	$C_2^{(1)}$	$C_2^{(2)}$	$C_2^{(3)}$	$C_2^{(4)}$
A_1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
E	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$

根据定义

$$\hat{P}(g)f(\boldsymbol{r})=f(g^{-1}\boldsymbol{r})$$

可得到 D_4 群的元素作用于空间(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz)上的结果，即

$$\hat{P}(E)\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\\xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\\xy\\xz\\yz\end{pmatrix}$$

$$\hat{P}(C_4^k)\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\\xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos^2\left(\frac{\pi}{2}k\right)x^2+\sin^2\left(\frac{\pi}{2}k\right)y^2\\ \sin^2\left(\frac{\pi}{2}k\right)x^2+\cos^2\left(\frac{\pi}{2}k\right)y^2\\ z^2\\ \cos(k\pi)xy\\ \cos\left(\frac{\pi}{2}k\right)xz+\sin\left(\frac{\pi}{2}k\right)yz\\ -\sin\left(\frac{\pi}{2}k\right)xz+\cos\left(\frac{\pi}{2}k\right)yz\end{pmatrix}$$

$$\hat{P}(C_2^{(k)})\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\\xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos^2\left(\frac{(k-1)\pi}{2}\right)x^2+\sin^2\left(\frac{(k-1)\pi}{2}\right)y^2\\ \sin^2\left(\frac{(k-1)\pi}{2}\right)x^2+\cos^2\left(\frac{(k-1)\pi}{2}k\right)y^2\\ z^2\\ -\cos((k-1)\pi)xy\\ -\cos\left(\frac{(k-1)\pi}{2}\right)xz-\sin\left(\frac{(k-1)\pi}{2}\right)yz\\ -\sin\left(\frac{(k-1)\pi}{2}\right)xz+\cos\left(\frac{(k-1)\pi}{2}k\right)yz\end{pmatrix}\tag{4.2.9}$$

可见 D_4 群把空间$(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz)$分为两个不变子空间$(x^2, y^2, z^2)$和$(xy, xz, yz)$.

恒等表示 A_1 的投影算子为

$$\hat{P}^{(A_1)}=\frac{1}{8}\sum_{g\in D_4}\hat{P}(g)$$

因而由(4.2.9)式得到

$$\hat{P}^{(A_1)}\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\\xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}(x^2+y^2)\\ \frac{1}{2}(x^2+y^2)\\ z^2\\ 0\\ 0\\ 0\end{pmatrix}$$

这说明$\frac{1}{2}(x^2+y^2)$和 z^2 都是不可约表示 A_1 的基矢，而 xy, xz, yz 都不包括 A_1 基矢的成分.

不可约表示 A_2 的投影算子为

$$\hat{P}^{(A_2)}=\frac{1}{8}\{\hat{P}(E)+\sum_{k=1}^{3}\hat{P}(C_4^k)-\sum_{k=1}^{4}\hat{P}(C_2^k)\}$$

容易得到

$$\hat{P}^{(A_2)}\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\\xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}$$

说明这个空间中不包括不可约表示 A_2.

不可约表示 B_1 的投影算子为

$$\hat{P}^{(B_1)} = \frac{1}{8}\{\hat{P}(E) - \hat{P}(C_4) - \hat{P}(C_4^3) + \hat{P}(C_4^2) + \hat{P}(C_2^{(1)}) + \hat{P}(C_2^{(3)}) - \hat{P}(C_2^{(2)}) - \hat{P}(C_2^{(4)})\}$$

由此式式可得到：

$$\hat{P}^{(B_1)}\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xy \\ xz \\ yz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(x^2 - y^2) \\ -\frac{1}{2}(x^2 - y^2) \\ z^2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

这表明$\frac{1}{2}(x^2 - y^2)$为不可约表示 B_1 的基矢.

对于不可约表示 B_2，投影算子为

$$\hat{P}^{(B_2)} = \frac{1}{8}\{\hat{P}(E) - \hat{P}(C_4) - \hat{P}(C_4^3) + \hat{P}(C_4^2) - \hat{P}(C_2^{(1)}) - \hat{P}(C_2^{(3)}) + \hat{P}(C_2^{(2)}) + \hat{P}(C_2^{(4)})\}$$

同样可得到

$$\hat{P}^{(B_2)}\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xy \\ xz \\ yz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ xy \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

即 xy 为不可约表示 B_2 的基矢.

对于不可约表示 E，投影算子为

$$\hat{P}_{11}^{(E)} = \frac{1}{4}[\hat{P}(E) - \hat{P}(C_4^2) - \hat{P}(C_2^{(1)}) + \hat{P}(C_2^{(3)})]$$

$$\hat{P}_{22}^{(E)} = \frac{1}{4}[\hat{P}(E) - \hat{P}(C_4^2) + \hat{P}(C_2^{(1)}) - \hat{P}(C_2^{(3)})]$$

由此得到

$$\hat{P}_{11}^{(E)}\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xy \\ xz \\ yz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ xz \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{P}_{22}^{(E)}\begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \\ xy \\ xz \\ yz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ yz \end{pmatrix}$$

即不可约表示的基矢为(xz, yz).

概括以上结果，可见空间$L^{(6)}(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz)$可分解为$D_4$群不可约表示空间$L^{(A_1)(1)}$(基矢为$(x^2+y^2)$)，$L^{(A_1)(2)}$(基矢为$z^2$)，$L^{(B_1)}$(基矢为$(x^2-y^2)$)，$L^{(B_2)}$(基矢为$xy$)和$L^{(E)}$(基矢为$(xz, yz)$)的直和，即

$$L^{(6)} = L^{(A_1)(1)} \oplus L^{(A_1)(2)} \oplus L^{(B_1)} \oplus L^{(B_1)} \oplus L^{(E)}$$

4.2.3 T群的投影算子与对称性匹配的基矢

在第三章3.4节中给出了T群三维不可约表示的表示矩阵，它们为

$$E=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\qquad C_2^{(1)}=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(2)}=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\qquad C_2^{(3)}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$C_3^{(1)}=\begin{pmatrix}0&0&-1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\qquad C_3^{(2)}=\begin{pmatrix}0&0&-1\\1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix}$$

$$C_3^{(3)}=\begin{pmatrix}0&0&-1\\-1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\qquad C_3^{(4)}=\begin{pmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix},$$

$$C_3^{(1)2}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\-1&0&0\end{pmatrix},\qquad C_3^{(2)2}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\-1&0&0\end{pmatrix},$$

$$C_3^{(3)2}=\begin{pmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix},\qquad C_3^{(4)2}=\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&-1\\1&0&0\end{pmatrix},$$

由此得到不可约表示T的投影算子

$$\hat{P}_{11}^{(T)}=\frac{1}{4}[\hat{P}(E)-\hat{P}(C_2^{(1)})-\hat{P}(C_2^{(2)})+\hat{P}(C_2^{(3)})]$$

$$\hat{P}_{22}^{(T)}=\frac{1}{4}[\hat{P}(E)-\hat{P}(C_2^{(1)})+\hat{P}(C_2^{(2)})-\hat{P}(C_2^{(3)})]$$

$$\hat{P}_{33}^{(T)}=\frac{1}{4}[\hat{P}(E)+\hat{P}(C_2^{(1)})-\hat{P}(C_2^{(2)})-\hat{P}(C_2^{(3)})]$$

第三章已给出

$$\hat{P}(E)\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix},\qquad \hat{P}(C_2^{(1)})\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-xy\\-xz\\yz\end{pmatrix}$$

$$\hat{P}(C_2^{(2)})\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-xy\\xz\\-yz\end{pmatrix},\qquad \hat{P}(C_2^{(3)})\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}xy\\-xz\\-yz\end{pmatrix}$$

$$\hat{P}(C_2^{(i)})\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\end{pmatrix}$$

由投影算子的结构可看出

$$\hat{P}_{ii}^{(T)}\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}$$

这表明子空间(x^2, y^2, z^2)不包括不可约表示 T.

对子空间(xy, xz, yz)可得到：

$$\hat{P}_{11}^{(T)}\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}xy\\0\\0\end{pmatrix},\quad \hat{P}_{22}^{(T)}\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\xz\\0\end{pmatrix},\quad \hat{P}_{33}^{(T)}\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\yz\end{pmatrix}$$

因而(xy, xz, yz)构成不可约表示 T 的基矢.

对于 T 群不可约表示 A 和 B_1、B_2，可得到投影算子分别为

$$\hat{P}^{(A)}=\frac{1}{12}\left[\hat{P}(E)+\sum_{k=1}^{3}\hat{P}(C_2^{(k)})+\sum_{k=1}^{4}\hat{P}(C_3^{(k)})+\sum_{k=1}^{4}\hat{P}(C_3^{(k)2})\right]$$

$$\hat{P}^{(B_1)}=\frac{1}{12}\left[\hat{P}(E)+\sum_{k=1}^{3}\hat{P}(C_2^{(k)})+\varepsilon\sum_{k=1}^{4}\hat{P}(C_3^{(k)})+\varepsilon^*\sum_{k=1}^{4}\hat{P}(C_3^{(k)2})\right]$$

$$\hat{P}^{(B_2)}=\frac{1}{12}\left[\hat{P}(E)+\sum_{k=1}^{3}\hat{P}(C_2^{(k)})+\varepsilon^*\sum_{k=1}^{4}\hat{P}(C_3^{(k)})+\varepsilon\sum_{k=1}^{4}\hat{P}(C_3^{(k)2})\right]$$

其中 $\varepsilon=\exp\left(\mathrm{i}\,\frac{2\pi}{3}\right)$.

显然

$$\left[\hat{P}(E)+\sum_{k=1}^{3}\hat{P}(C_2^{(k)})\right]\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}$$

可以计算出

$$[\hat{P}(C_3^{(1)})+\hat{P}(C_3^{(2)})+\hat{P}(C_3^{(3)})+\hat{P}(C_3^{(4)})]\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}$$

$$[\hat{P}(C_3^{(1)2})+\hat{P}(C_3^{(2)2})+\hat{P}(C_3^{(3)2})+\hat{P}(C_3^{(4)2})]\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}$$

因而

$$\hat{P}^{(A)}\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\hat{P}^{(B_1)}\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\hat{P}^{(B_2)}\begin{pmatrix}xy\\xz\\yz\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}$$

这说明子空间(xy, xz, yz)不包括 T 群不可约表示 A、B_1、B_2.

对于子空间(x^2, y^2, z^2)除

$$\hat{P}(C_2^{(i)})\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\end{pmatrix}$$

其它元素作用为

$$\hat{P}(C_3^{(i)})\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}z^2\\x^2\\y^2\end{pmatrix},\quad \hat{P}(C_3^{(i)2})\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}y^2\\z^2\\x^2\end{pmatrix}$$

由此得到

$$\hat{P}^{(A)}\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\end{pmatrix}=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}x^2+y^2+z^2\\x^2+y^2+z^2\\x^2+y^2+z^2\end{pmatrix}$$

因而 $x^2+y^2+z^2$ 为恒等表示 A 的基矢.

对于 $\hat{P}^{(B_1)}$ 和 $\hat{P}^{(B_2)}$ 可得到

$$\hat{P}^{(B_1)}\begin{pmatrix}x^2\\y^2\\z^2\end{pmatrix}=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}x^2+\varepsilon y^2+\varepsilon^* z^2\\y^2+\varepsilon z^2+\varepsilon^* x^2\\z^2+\varepsilon x^2+\varepsilon^* y^2\end{pmatrix}$$

其中

$$y^2+\varepsilon z^2+\varepsilon^* x^2=\varepsilon^*\left(x^2+\frac{1}{\varepsilon^*}y^2+\frac{\varepsilon}{\varepsilon^*}z^2\right)=\varepsilon^*(x^2+\varepsilon y^2+\varepsilon^* z^2)$$

$$z^2+\varepsilon x^2+\varepsilon^* y^2=\varepsilon\left(x^2+\frac{\varepsilon^*}{\varepsilon}y^2+\frac{1}{\varepsilon}z^2\right)=\varepsilon(x^2+\varepsilon y^2+\varepsilon^* z^2)$$

可见

$$z^2+\varepsilon x^2+\varepsilon^* y^2 \quad 或 \quad (x^2+\varepsilon y^2+\varepsilon^* z^2,\ y^2+\varepsilon z^2+\varepsilon^* x^2)$$

为不可约表示 B_1 的基矢. 同样对投影算子 $\hat{P}^{(B_2)}$ 可得到不可约表示 B_2 的基矢为 $z^2+\varepsilon^* x^2+\varepsilon y^2$.

容易得到

$$z^2+\varepsilon x^2+\varepsilon^* y^2+z^2+\varepsilon^* x^2+\varepsilon y^2=2z^2-x^2-y^2$$

$$z^2+\varepsilon x^2+\varepsilon^* y^2-z^2-\varepsilon^* x^2-\varepsilon y^2=i\frac{\sqrt{3}}{2}(x^2-y^2)$$

基矢($2z^2-x^2-y^2$, x^2-y^2)就是通常特征标表中把 B_1 与 B_2 视为二维可约表示时所标明的基矢.

4.3　分子结构中的 LCAO-MO 与 SALC-MO 方法

分子是由多个原子组成的，其中每个原子的内壳层电子基本保持孤立原子情况下的运动状态，而只有外壳层的电子(价电子)才参与形成化学键. 这些电子脱离了原来定域在特定原子中运动的状态，而组合成在整个分子中运动的分子轨道. 由于分子具有一定的对称性，这些分子轨道必然也具有相应的对称性.

4.3.1　分子轨道 LCAO-MO 方法

作为对分子轨道的一种很好的近似描述，是把分子轨道描写为这些原子轨道的线性组合，即由原子轨道的线性组合构成的分子轨道——LCAO-MO，可写为

$$\Psi_k = \sum_i C_{ik}\psi_i \tag{4.3.1}$$

其中 ψ_i 为第 i 个原子参与形成化学键的原子轨道(即原子波函数)，Ψ_k 为分子的第 k 个轨道(分子轨道，亦即分子波函数)，ψ_i 是归一化的.

实际上，就是由 n 个原子轨道 ψ_i 为基矢，构成了 n 维的模型空间. 在这一空间的基础上求解分子体系的 Schrodinger 方程，即

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{4.3.2}$$

令

$$\Psi = \sum_i C_i\psi_i \tag{4.3.3}$$

于是

$$\sum_i C_i\hat{H}\psi_i = E\sum_i C_i\psi_i$$

以 ψ_j^* 左乘上式并积分得到

$$\sum_i C_i\int\psi_j^*\hat{H}\psi_i\mathrm{d}\tau = E\sum_i C_i\int\psi_j^*\psi_i\mathrm{d}\tau$$

其中定义

$$\int\psi_j^*\psi_i\mathrm{d}\tau = S_{ij} = \langle j|\,i\rangle \tag{4.3.4}$$

称为重叠积分，因为 ψ_i，ψ_j 分别为第 i 和第 j 个原子上的原子轨道，它们的积分在物理上反映这两个原子轨道重叠的程度.

$$\int\psi_j^*\hat{H}\psi_i\mathrm{d}\tau = \langle j|\,H\,|\,i\rangle \tag{4.3.5}$$

是 Hamilton 算子在 $\{\psi_i\}$ 构成的模型空间中的矩阵元. 于是可把前面的方程写为

$$\sum_i C_i[\langle j|\,H\,|\,i\rangle - ES_{ji}] = 0 \tag{4.3.6}$$

j 由 1 变到 n，得到 n 个线性齐次方程组. $\langle j|H|i\rangle$ 和 S_{ji} 在 ψ_i 取定之后就完全确定了，因而方程(4.3.6)的本征方程(或久期方程)为

$$|\hat{H} - \hat{E}S| = 0 \tag{4.3.7}$$

(4.3.7)式中 $\hat{H}$ 为以 $\langle j|H|i\rangle$ 为元素的模型空间中的 Hamilton 矩阵，$\hat{S}$ 为重叠积分矩阵. 由(4.3.7)式求出能量本征值 E. (4.3.7)为 E 的 n 次方程，原则上存在 n 个根(即 n 个能量本征值)，把一定的能量本征值 E_k 代入方程(4.3.6)就可求出系数 C_i，记为 C_{ki}，于是就得到了本征值为 E_k 的分子轨道.

$$\Psi_k = \sum_i C_{ki}\psi_i \tag{4.3.8}$$

当然 n 个本征值 E_k 可能存在重根，此时分子轨道出现简并.

方程(4.3.6)和(4.3.7)是用 LCAO-MO 方法求解分子结构的基本方程. 在量子化学中，由于对这两个方程引入不同近似而产生了各种近似方法.

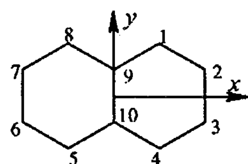
4.3.2 对称匹配分子轨道 SALC-MO 方法

分子都有特定的点群对称性，如果在原子轨道构成的模型空间上建立点群的不可约表示，利用投影算子方法寻求出由原子轨道构成的对称性匹配的基矢，或者说对称性匹配的分子轨道——SALC-MO. 这样久期方程(4.3.7)将准对角化，于是大大减少了求解能量本征值的工作量. 这是群表示理论在分子结构中的一个重要应用.

4.3.3 休克尔近似方法

当我们讨论 π 电子体系的分子轨道时，常用的一种近似方法称为休克尔近似，用 HMO 表示.

在这种近似下，分子本身的对称性是严格的，用体系的 $\pi(p_z)$ 轨道作为群轨道的的线性组合. 休克尔近似只考虑最邻近的 π 轨道相互作用，而忽略了次邻近的 π 轨道相互作用. 基本假定如下：



4.3.1 萘分子结构图

(1)当两个原子轨道 i 和 j 不相邻近时，(4.3.5)式中所有的 $H_{ij}=0$，(4.3.4)式中所有的 $S_{ij}=0$.

(2)当两个原子轨道 i 和 j 相邻时($i=j\pm1$)，(4.3.5)式中，$H_{ij}=\beta$，(4.3.4)式中 $S_{ij}=1$.

(3)同一个原子轨道的哈密顿 $H_{ii}=\alpha$.

其中 β 是两个 p_z 轨道之间的重迭积分，$\beta<0$，而 α 为 C 原子 $2p_z$ 轨道的电子能量.

下面讨论萘分子 HMO，萘分子由 10 个碳原子构成，这 10 个碳原子位于 x-y 平面中，如图 4.3.1 所示. 该分子具有点群 D_{2h} 对称性. 每个碳原子贡献一个 $\pi(p_z)$ 轨道. 10 个 $p\pi$ 轨道用 $p_z^{(i)}$，$i=1, 2, \cdots, 10$ 标记. 10 个 $p\pi$ 轨道在 D_{2h} 群中的可约表示为

D_{2h}	E	$C_2(z)$	$C_2(x)$	$C_2(y)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$
Γ_π	10	0	0	−2	0	−10	0	2

由第一章不可约表示特征标第一正交性质(1.10.8)式可得到可约表示向不可约表示分解的重复度表达式 α_i，即用(4.3.9)式上面的可约表示很容易分解为不可约表示

$$\Gamma_\pi = 2a_u + 2b_{2g} + 3b_{1u} + 3b_{3g}$$

10 个 $p\pi$ 轨道在 D_{2h} 群中形成 3 个子集合，每个子集合中的成员彼此都是对称性等价的，而各子集合之间的成员是不等价的. 这些子集合和它们为基的不可约表示为

集合 1:　$p_z^{(1)}, p_z^{(4)}, p_z^{(5)}, p_z^{(8)}$;　$a_u, b_{1u}, b_{2g}, b_{3g}$

集合 2:　$p_z^{(2)}, p_z^{(3)}, p_z^{(6)}, p_z^{(7)}$;　$a_u, b_{1u}, b_{2g}, b_{3g}$

集合 3:　$p_z^{(9)}, p_z^{(10)}$;　b_{1u}, b_{3g}

因此，萘分子的 10 个 $p\pi$ 轨道有 2 个属于 a_u 不可约表示，2 个属于 b_{2g}不可约表示，3 个属于 b_{1u}和 3 个属于 b_{3g}不可约表示. 10×10 久期行列式分解为 2 个 2×2 和 2 个 3×3 久期行列式. 用投影算符的方法可求得对称匹配分子轨道.

按定义构造出 D_{2h}群这些不可约表示的投影算子，即

$$\hat{P}^{(a_u)} = \frac{1}{8}[\hat{P}(E) + \hat{P}(C_2(z)) + \hat{P}(C_2(y)) + \hat{P}(C_2(x)) - \hat{P}(i) - \hat{P}(\sigma(xy)) - \hat{P}(\sigma(xz)) - \hat{P}(\sigma(yz))]$$

$$\hat{P}^{(b_{2g})} = \frac{1}{8}[\hat{P}(E) - \hat{P}(C_2(z)) + \hat{P}(C_2(y)) - \hat{P}(C_2(x)) + \hat{P}(i) - \hat{P}(\sigma(xy)) + \hat{P}(\sigma(xz)) - \hat{P}(\sigma(yz))]$$

$$\hat{P}^{(b_{3g})} = \frac{1}{8}[\hat{P}(E) - \hat{P}(C_2(z)) - \hat{P}(C_2(y)) + \hat{P}(C_2(x)) + \hat{P}(i) - \hat{P}(\sigma(xy)) - \hat{P}(\sigma(xz)) + \hat{P}(\sigma(yz))]$$

$$\hat{P}^{(b_{1u})} = \frac{1}{8}[\hat{P}(E) + \hat{P}(C_2(z)) - \hat{P}(C_2(y)) - \hat{P}(C_2(x)) - \hat{P}(i) - \hat{P}(\sigma(xy)) + \hat{P}(\sigma(xz)) + \hat{P}(\sigma(yz))]$$

利用这些算子分别作用 3 个集合中的任意原子轨道 $p_z^{(i)}$，求得对称性匹配的基矢，再进行归一化. 2 个不可约表示 a_u 的基矢为

$$\Psi_1^{(a_u)} = \frac{1}{2}[p_z^{(1)} - p_z^{(4)} + p_z^{(5)} - p_z^{(8)}]$$

$$\Psi_2^{(a_u)} = \frac{1}{2}[p_z^{(2)} - p_z^{(3)} + p_z^{(6)} - p_z^{(7)}]$$

3 个不可约表示 b_{1u}的基矢为

$$\Psi_1^{(b_{1u})} = \frac{1}{2}[p_z^{(1)} + p_z^{(4)} + p_z^{(5)} - p_z^{(8)}]$$

$$\Psi_2^{(b_{1u})} = \frac{1}{2}[p_z^{(2)} + p_z^{(3)} + p_z^{(6)} + p_z^{(7)}]$$

$$\Psi_3^{(b_{1u})} = \frac{1}{\sqrt{2}}[p_z^{(9)} + p_z^{(10)}]$$

2 个不可约表示 b_{2g}的基矢为

$$\Psi_1^{(b_{2g})} = \frac{1}{2}[p_z^{(1)} + p_z^{(4)} - p_z^{(5)} - p_z^{(8)}]$$

$$\Psi_2^{(b_{2g})}=\frac{1}{2}[p_z^{(2)}+p_z^{(3)}-p_z^{(6)}-p_z^{(7)}]$$

3 个不可约表示 b_{3g} 的基矢为

$$\Psi_1^{(b_{3g})}=\frac{1}{4}[p_z^{(1)}-p_z^{(4)}-p_z^{(5)}+p_z^{(8)}]$$

$$\Psi_2^{(b_{3g})}=\frac{1}{4}[p_z^{(2)}-p_z^{(3)}-p_z^{(6)}+p_z^{(7)}]$$

$$\Psi_3^{(b_{3g})}=\frac{1}{\sqrt{2}}[p_z^{(9)}-p_z^{(10)}]$$

根据休克尔近似假定，得到下面 4 个久期方程：

$$a_{1u}:\quad \begin{vmatrix} \alpha-E & \beta \\ \beta & \alpha-\beta-E \end{vmatrix}=0$$

$$b_{1u}:\quad \begin{vmatrix} \alpha-E & \beta & \sqrt{2}\beta \\ \beta & \alpha+\beta-E & 0 \\ \sqrt{2}\beta & 0 & \alpha+\beta-E \end{vmatrix}=0$$

$$b_{2g}:\quad \begin{vmatrix} \alpha-E & \beta \\ \beta & \alpha+\beta-E \end{vmatrix}=0$$

$$b_{3g}:\quad \begin{vmatrix} \alpha-E & \beta & \sqrt{2}\beta \\ \beta & \alpha-\beta-E & 0 \\ \sqrt{2}\beta & 0 & \alpha-\beta-E \end{vmatrix}=0$$

令 $\frac{\alpha-E}{-\beta}=x$，则

$$a_u:\quad \begin{vmatrix} x & -1 \\ -1 & x+1 \end{vmatrix}=x^2+x-1$$

$$x=-1.618,\quad 0.618$$

$$E=\alpha-1.618\beta,\quad \alpha+0.618\beta$$

$$b_{1u}:\quad \begin{vmatrix} x & -1 & -\sqrt{2} \\ -1 & x-1 & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & x-1 \end{vmatrix}=(x-1)(x^2-x-3)=0$$

$$x=1,\quad x=2.303,\quad -1.303$$

$$E=\alpha+\beta,\quad \alpha+2.303\beta,\quad \alpha-1.303\beta$$

$$b_{2g}:\quad \begin{vmatrix} x & -1 \\ -1 & x-1 \end{vmatrix}=x^2-x-1=0$$

$$x=1.618,\ -0.618$$

$$E=\alpha+1.618\beta,\quad \alpha-0.618\beta$$

$$b_{3g}: \begin{vmatrix} x & -1 & -\sqrt{2} \\ -1 & x+1 & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & x+1 \end{vmatrix} = (x+1)(x^2+x-3) = 0$$

$$x = -1, \quad -2.303, \quad 1.303$$

$$E = \alpha + \beta, \quad \alpha - 2.303\beta, \quad \alpha + 1.303\beta$$

萘分子的能级图示于图 4.3.2. 由能级图得到基态萘分子的电子组态为按着化学中习惯，单个电子轨道的不可约表示用小写字母表示.

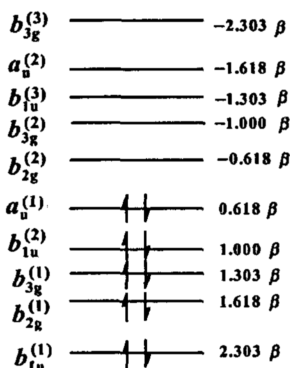


图 4.3.2　萘 10π 轨道能级图

$$b_{1u}^2 b_{2g}^2 b_{3g}^2 b_{1u}^2 a_u^2$$

萘分子非定能为

$$2(2.303+1.618+1.303+1.000+0.618)$$

$$\beta - 10\beta = 3.684\beta$$

把每一个久期方程的解 x 代入久期方程可以求得对称匹配的函数. 对 a_u 表示, $x=0.618$ 代入久期方程得

$$\begin{cases} C_1(0.618) - C_2 = 0 \\ -C_1 + C_2(0.618) = 0 \end{cases}$$

由第一式可得 $C_1/C_2=1.618$，利用归一化条件有 $C_1^2+C_2^2=1$，解出 C_1 和 C_2 得到 $C_1=0.850$，$C_2=0.526$. 因此，成键的 a_u 分子轨道为

$$\begin{aligned}\Psi_1(a_u) &= 0.850\Psi_1^{(a_u)} + 0.526\Psi_2^{(a_u)} \\ &= 0.425(p_z^{(1)} - p_z^{(4)} + p_z^{(5)} - p_z^{(8)}) + 0.263(p_z^{(2)} - p_z^{(3)} + p_z^{(6)} - p_z^{(7)})\end{aligned}$$

用同样对萘的所有分子轨道进行计算，结果列于下表.

萘分子轨道

分子轨道	能量	对称匹配分子轨道(LCAO)
$\Psi_1(b_{1u})$	$\alpha+2.303\beta$	$0.301(p_z^{(1)}+p_z^{(4)}+p_z^{(5)}+p_z^{(8)})+0.231(p_z^{(2)}+p_z^{(3)}+p_z^{(6)}+p_z^{(7)})+0.461(p_z^{(9)}+p_z^{(10)})$
$\Psi_1(b_{2g})$	$\alpha+1.618\beta$	$0.263(p_z^{(1)}+p_z^{(4)}-p_z^{(5)}-p_z^{(8)})+0.425(p_z^{(2)}+p_z^{(3)}-p_z^{(6)}-p_z^{(7)})$
$\Psi_1(b_{3g})$	$\alpha+1.303\beta$	$0.400(p_z^{(1)}-p_z^{(4)}-p_z^{(5)}+p_z^{(8)})+0.174(p_z^{(2)}-p_z^{(3)}-p_z^{(6)}+p_z^{(7)})+0.347(p_z^{(9)}-p_z^{(10)})$
$\Psi_2(b_{1u})$	$\alpha+1.000\beta$	$0.408(p_z^{(2)}+p_z^{(3)}+p_z^{(6)}+p_z^{(7)})-0.408(p_z^{(9)}+p_z^{(10)})$
$\Psi_1(a_u)$	$\alpha+0.618\beta$	$0.425(p_z^{(1)}-p_z^{(4)}+p_z^{(5)}-p_z^{(8)})+0.263(p_z^{(2)}-p_z^{(3)}+p_z^{(6)}-p_z^{(7)})$
$\Psi_2(b_{2g})$	$\alpha-0.618\beta$	$0.425(p_z^{(1)}+p_z^{(4)}-p_z^{(5)}-p_z^{(8)})-0.263(p_z^{(2)}+p_z^{(3)}-p_z^{(6)}-p_z^{(7)})$
$\Psi_2(b_{3g})$	$\alpha-1.000\beta$	$0.408(p_z^{(2)}-p_z^{(3)}-p_z^{(6)}+p_z^{(7)})-0.408(p_z^{(9)}-p_z^{(10)})$
$\Psi_3(b_{1u})$	$\alpha-1.303\beta$	$0.404(p_z^{(1)}+p_z^{(4)}+p_z^{(5)}+p_z^{(8)})-0.174(p_z^{(2)}+p_z^{(3)}+p_z^{(6)}+p_z^{(7)})-0.347(p_z^{(9)}+p_z^{(10)})$
$\Psi_2(a_u)$	$\alpha-1.618\beta$	$0.263(p_z^{(1)}-p_z^{(4)}+p_z^{(5)}-p_z^{(8)})+0.425(p_z^{(2)}-p_z^{(3)}+p_z^{(6)}-p_z^{(7)})$
$\Psi_3(b_{3g})$	$\alpha-2.303\beta$	$0.301(p_z^{(1)}-p_z^{(4)}-p_z^{(5)}+p_z^{(8)})-0.231(p_z^{(2)}-p_z^{(3)}-p_z^{(6)}+p_z^{(7)})-0.461(p_z^{(9)}-p_z^{(10)})$

通过萘分子的例子，我们总结构造对称匹配基矢的步骤如下：

(1)在原子轨道构成的模型空间上建立分子对称群 G 的表示，找到它们的特征标.

只须观察在群 G 的对称操作下,分子中的原子轨道的变化.

(a)如果对称操作使分子中的所有原子轨道都发生变化，它的表示矩阵的对角元全为零,则这个对称操作的特征标为零.

(b)如果对称操作使分子中的 x 个原子轨道不动，则这个操作的特征标为 x.

(c)如果对称操作使分子中的 x 个原子轨道改变一个负号，则这个操作的特征标为 $-x$.

(2)找到原子轨道构成的模型空间上对称群 G 的特征标后，这个表示一般是可约表示. 利用群 G 的特征标表和(4.3.9)式求出这个可约表示在群 G 中不可约表示出现的次数，从而把这个可约表示分解为不可约表示的直和.

(3)在对称群 G 的对称操作下，把原子轨道分成若干个等价的集合.

(4)利用投影算子，作用等价集合中的任意原子轨道上，可得到对称匹配的基矢. 如果对称群 G 包括二维或二维以上的不可约表示，构造投影算子需要表示矩阵，如果没有表示矩阵，可用特征标构造出不完全投影算子，利用它把原子轨道分成各种不可约表示空间.

4.4 不同对称性分子的分子轨道的对称性分析

在这一节中将把上节讨论的对称性匹配分子轨道(SALC-MO)结合几个具有不同对称性的分子进行进一步的分析. 并给出它们在量子化学计算中的实际应用.

4.4.1 C_{2v}对称性分子的对称匹配轨道

H_2O 分子属于 C_{2v}对称性. 氧原子联结二个氢原子，两个氢原子间的夹角为105°，水分子的对称性如图 4.1 所示. 参与分子轨道的组合有氧原子的 $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ 四个原子轨道和二个氢原子的 $1s$ 原子轨道，用 H_1 和 H_2 表示它们.

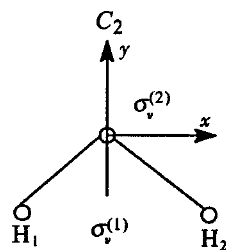


图 4.4.1 水分子的对称性

氧原子的 $2s$ 轨道是球形的，在 C_{2v}所有对称操作作用下均不变，因此 $2s$ 轨道属于 a_1 不可约表示. 而 $2p_x$, $2p_y$ 和 $2p_z$ 三个原子轨道的行为和坐标 x, y, z 的行为相同. 因此分别属于 b_1, b_2 和 a_1 不可约表示(按惯例，分子轨道的对称必用小写字母标记). H_1 和 H_2 原子轨道作为一组不可分的基函数，在 C_{2v}群对称操作作用下，得到一个二维的可约表示.

$$E\begin{pmatrix}H_1\\H_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}H_1\\H_2\end{pmatrix},\quad C_2\begin{pmatrix}H_1\\H_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}H_1\\H_2\end{pmatrix}$$

$$\sigma_v^{(1)}\begin{pmatrix}H_1\\H_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}H_1\\H_2\end{pmatrix},\quad \sigma_v^{(2)}\begin{pmatrix}H_1\\H_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}H_1\\H_2\end{pmatrix}$$

二维表示的特征标为2，0，0，2，由 C_{2v}的特征标表可以看出，它可以约化为 $a_1\oplus b_2$. 因

此，H_1 和 H_2 需要重新组合成二个对称性匹配的原子轨道属于 a_1 的为$\frac{1}{\sqrt{2}}(H_1+H_2)$，属于 b_2 的为$\frac{1}{\sqrt{2}}(H_1-H_2)$，$H_2O$ 中属于 a_1 的三个对称匹配原子轨道为

$$\Phi_1=2s,\quad \Phi_2=p_z,\quad \Phi_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(H_1+H_2)$$

属于 B_1 的一个原子轨道为

$$\Phi_4=2p_x$$

属于 B_2 的二个对称匹配原子轨道为

$$\Phi_5=2p_y,\quad \Phi_6=\frac{1}{\sqrt{2}}(H_1-H_2)$$

氧的 $1s$ 轨道也属于 a_1 不可约表示，它处于内层轨道，在 H_2O 中属于最低能级为 $1a_1$. 当 Φ_i 和 Φ_j 属于不同的不可约表示时，矩阵元 $H_{ij}=\int\Phi_i H\Phi_j \mathrm{d}\tau$ 积分值为零，6 个 Φ 分别属于三个不同的不可约表示，因此 6×6 久期方程劈为三个因子.

$$\begin{vmatrix} H_{11}-E & H_{12}-ES_{12} & H_{13}-ES_{13} \\ H_{21}-ES_{21} & H_{22}-E & H_{23}-ES_{23} \\ H_{31}-ES_{31} & H_{32}-ES_{32} & H_{33}-E \end{vmatrix}=0$$

$$H_{44}-E=0$$

$$\begin{vmatrix} H_{55}-E & H_{56}-ES_{56} \\ H_{65}-ES_{65} & H_{66}-E \end{vmatrix}=0$$

利用群论把 6 阶久期方程简化了，在具体计算中利用厄米性质 $H_{ij}=H_{ji}$，$S_{ij}=S_{ji}$解 3 个久期方程，得到在 H_2O 中有 3 个 a_1 能级，1 个 b_1 能级是非键轨道，2 个 b_2 能级. 分子光谱上用以上符号作为能级标号. 3 个 a_1 能级中有二个是成键轨道，一个反键轨道. 2 个 b_2 能级有一个是成键轨道和一个反键轨道，能级的次序完全依靠计算确定. 不过根据上面的讨论可以推断出 H_2O 的能级次序如图 4.4.2. 由图 4.4.2 得到 H_2O 基态电子组态是

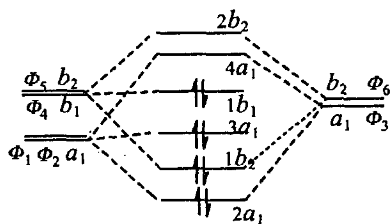


图 4.4.2　水分子能级图

$$(1a_1)^2(2a_1)^2(1b_2)^2(3a_1)^2(1b_1)^2$$

其中$(1a_1)^2$ 代表氧的内层电子，$(2a_1)^2(1b_2)^2$ 是两对成键电子，它对应于两个 O—H 键，而$(3a_1)^2(1b_1)^2$ 代表 H_2O 分中两对孤对电子. 孤对电子的能量高，且一端裸露，容易生成氢键.

4.4.2　C_{3v}对称性分子的对称性匹配轨道

NH_3 分子属于 C_{3v}对称性. 氮原子联结三个氢原子如图 4.2.3 所示. ∠HNH 角度为 106°，氮原子的 $1s$ 处于内层仍保留为原子轨道性质. 参与分子轨道组合有 7 个原子轨

道，它们是氮原子的 $2s$，$2p_x$，$2p_y$ 和 $2p_z$ 以及三个氢原子的 $1s$ 轨道，简记为 H_1，H_2 和 H_3.

$$E\begin{pmatrix}H_1\\H_2\\H_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}H_1\\H_2\\H_3\end{pmatrix}\qquad C_3\begin{pmatrix}H_1\\H_2\\H_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}H_1\\H_2\\H_3\end{pmatrix}$$

$$\sigma_v\begin{pmatrix}H_1\\H_2\\H_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}H_1\\H_2\\H_3\end{pmatrix}$$

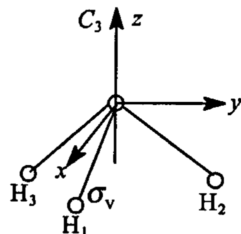


图 4.4.3　NH_3 分子的对称性

由此得出三维表示特征标等于 3，0，1，它约化成 $a_1\oplus e$. 由投影算子可得到对称性匹配轨道 Φ_5，Φ_6，Φ_7 具有下列标准变换形式，即

$$\begin{pmatrix}\Phi_5\\\Phi_6\\\Phi_7\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}&\frac{1}{\sqrt{3}}&\frac{1}{\sqrt{3}}\\0&\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{2}{\sqrt{6}}&-\frac{1}{\sqrt{6}}&-\frac{1}{\sqrt{6}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}H_1\\H_2\\H_3\end{pmatrix}$$

NH_3 中 7 个对称匹配轨道分别为 3 个属于不可约表示 A_1 和 2 个不可约表示 E，即

$$a_1:\ \Phi_1=2s,\ \Phi_2=2p_z,\ \Phi_5=\frac{1}{\sqrt{3}}(H_1+H_2+H_3)$$

$$e:\ \Phi_4=2p_x,\ \Phi_5=2p_y,\ \Phi_6=\frac{1}{\sqrt{2}}(H_2-H_3),\ \Phi_7=\frac{1}{\sqrt{6}}(2H_1-H_2-H_3)$$

7 阶久期方程分解一个 3 阶久期方程和一个 4 阶久期方程. 对于三个不可约表示 A_1 的 3 阶久期方程为

$$\begin{vmatrix}H_{11}-E&H_{12}-ES_{12}&H_{13}-ES_{13}\\H_{21}-ES_{21}&H_{22}-E&H_{23}-ES_{23}\\H_{31}-ES_{31}&H_{32}-ES_{32}&H_{33}-E\end{vmatrix}=0$$

解方程得 3 个根，$2a_1$，$3a_1$ 为成键轨道，$4a_1$ 为反键轨道.

根据群论定理：若 $\Gamma^{(s)}$ 和 $\Gamma^{(t)}$ 是相同的不可约表示，它们的维数为 n_s，基矢为(Φ_1，Φ_2，…，Φ_{n_s})和(f_1，f_2，…，f_{n_s})是两组不同的基向量，如果它们的变换矩阵也相同，则

$$\int\Phi_iHf_k\mathrm{d}\tau=0\qquad(\text{当 } i\neq k)$$

$$\int\Phi_1Hf_1\mathrm{d}\tau=\int\Phi_2Hf_2\mathrm{d}\tau=\cdots=\int\Phi_{n_s}Hf_{n_s}\mathrm{d}\tau$$

对于 E 不可约表示的 4 阶久期方程，根据上面的讨论 4 阶的久期方程劈成 2 个 2 阶久期方程，它的基向量分别为(Φ_4，Φ_6)和(Φ_5，Φ_7). 于是得到

$$\begin{vmatrix}H_{44}-E&H_{46}-ES_{46}\\H_{64}-ES_{64}&H_{66}-E\end{vmatrix}=0$$

$$\begin{vmatrix} H_{55}-E & H_{57}-ES_{57} \\ H_{75}-ES_{75} & H_{77}-E \end{vmatrix}=0$$

由于

$$H_{44}=H_{66}=H_{55}=H_{77}$$

$$S_{46}=S_{64}=S_{57}=S_{75}$$

解上面 2 个久期方程，得到两个二重根 $1e$，$2e$，其中 $1e$ 为成键轨道，$2e$ 为反键轨道. NH_3 分子的能级次序如图 4.4.4 所示.

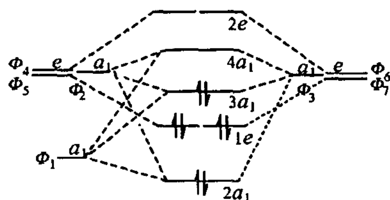


图 4.4.4　NH_3 分子能级图

由图 4.4.4 得到 NH_3 分子基态的电子组态为

$$(1a_1)^2(2a_1)^2(1e)^4(3a_1)^2$$

其中 $(1a_1)^2$ 代表氮原子内层电子. $(2a_1)^2(1e)^4$ 是三对成键电子，它对应于三个 N—H 键，而 $(3a_1)^2$ 代表 NH_3 中一对弧对电子. NH_3 也容易形成氢键.

4.4.3　D_{4h}对称性分子的对称匹配轨道

$[PtCl_4]^{2-}$分子属于 D_{4h}对称性. Pt 原子联结四个氯原子，处于同一平面中，构成正方形结构. Pt 原子轨道有 $5d$，$6s$ 和 $6p$. $6s$ 轨道属于 a_{1g}，三个 $6p$ 轨道与 x，y 和 z 行为相同，因此 p_z 属于 a_{2u}，p_x 和 p_y 属于 e_u，d_{z^2}与 z^2 行为相同，属于 a_{1g}，$d_{x^2-y^2}$与 x^2-y^2 行为相同，属于 b_{1g}，d_{xy}，d_{xz}和 d_{yz}与 xy，xz 和 yz 行为相同，d_{xy}属于 b_{2g}，而 d_{xz}，d_{yz}属于不可约表示 e_g. Pt 原子轨道按对称性分类为

a_{1g}：$6s$，d_{z^2}

b_{2g}：d_{xy}

a_{2u}：$6p_z$

e_g：d_{xz}，d_{yz}

b_{1g}：$d_{x^2-y^2}$

e_u：p_x，p_y

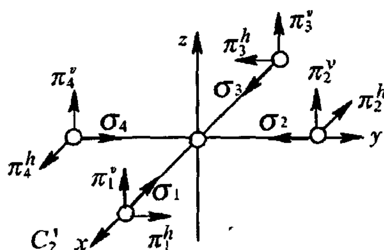


图 4.4.5　分子$[PtCl_4]^{2-}$空间结构

$[PtCl_4]^{2-}$分子的空间结构如图 4.4.5 所示.

下面讨论配位的 4 个 Cl 原子和轨道.

1. 配位体四个 σ 轨道

4 个 Cl 原子的 4 个 σ 轨道为 p_z^1，p_z^2，p_z^3 和 p_z^4 分别简记为 σ_1，σ_2，σ_3 和 σ_4. 下面用 D_{4h}子群 D_4 来研究 4 个 σ 轨道分类，用 D_4 的全部操作作用 4 个 σ 轨道得到下列的可约表示特征标

D_4	E	C_4	C_2^z	$2C_2'$	$2C_2''$
Γ_σ	4	0	0	2	0

利用(4.3.9)式将上面的可约表示约化为不可约表示

$$\Gamma_\sigma = a_1 \oplus b_1 \oplus e$$

4 个 σ 群轨道具有下列标准变换形式

$$\begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \end{pmatrix}$$

以上 4 个轨道在 D_{4h} 群，加上对称 g 和反对称 u 脚标可得到

$$a_{1g}:\quad \Phi_1 = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)$$

$$b_{1g}:\quad \Phi_2 = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2 + \sigma_3 - \sigma_4)$$

$$e_u:\quad \Phi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_1 - \sigma_3),\quad \Phi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_2 - \sigma_4)$$

2. 配位体的八个 π 轨道

对配位体 Cl 原子的 p 轨道，除前面讨论的称之为 σ 轨道的 p_z 外，还有八个 p_x，p_y 轨道称为 π 轨道. 其中 p_y^1，p_y^2，p_y^3 和 p_y^4 四个 π 轨道为垂直分子平面，另外 p_x^1，p_x^2，p_x^3 和 p_x^4 四个 π 轨道处于分子平面上. 四个垂直分子平面的 π 轨道示于图 4.4.6. 简记为 π_1^v，π_2^v，π_3^v 和 π_4^v，这 4 个垂直的 π 轨道构成的 D_4 群的可约表示特征标为

D_4	E	C_4	C_2^z	C_2'	C_2''
Γ_{π^v}	4	0	0	-2	0

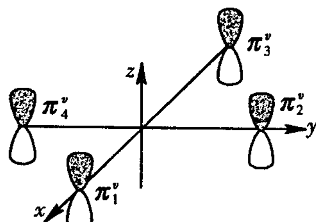


图 4.4.6　垂直于分子平面的 4 个 π 轨道

上面的可约表示约化为不可约表示为

$$\Gamma_\pi = a_1 \oplus b_2 \oplus e$$

4 个垂直 π 轨道具有下列标准变换形式

$$\begin{pmatrix} \Phi_5 \\ \Phi_6 \\ \Phi_7 \\ \Phi_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \pi_1^v \\ \pi_2^v \\ \pi_3^v \\ \pi_4^v \end{pmatrix}$$

以上 4 个 π 轨道在 D_{4h} 群中，加上对称 g 和反对称 u 脚标得到

$$a_{2u}:\quad \Phi_5=\frac{1}{2}(\pi_1^v+\pi_2^v+\pi_3^v+\pi_4^v)$$

$$b_{2u}:\quad \Phi_6=\frac{1}{2}(\pi_1^v-\pi_2^v+\pi_3^v-\pi_4^v)$$

$$e_g:\quad \Phi_7=\frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_1^v-\pi_3^v),\quad \Phi_8=\frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_2^v-\pi_4^v)$$

用同样的方法得到4个分子平面内的 π 轨道

$$a_{2g}:\quad \Phi_9=\frac{1}{2}(\pi_1^h+\pi_2^h+\pi_3^h+\pi_4^h)$$

$$b_{2g}:\quad \Phi_{10}=\frac{1}{2}(\pi_1^h-\pi_2^h+\pi_3^h-\pi_4^h)$$

$$e_u:\quad \Phi_{11}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_1^h-\pi_3^h),\quad \Phi_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_2^h-\pi_4^h)$$

$[PtCl_4]^{2-}$ 对称匹配轨道

对称类型	键型	维数	金属原子轨道	对称匹配轨道
a_{1g}	σ	3	d_{z^2}, s	$\Phi_1=\frac{1}{2}(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)$
a_{2g}	非键	1		$\Phi_9=\frac{1}{2}(\pi_1^h+\pi_2^h+\pi_3^h+\pi_4^h)$
a_{2u}	π	2	p_z	$\Phi_5=\frac{1}{2}(\pi_1^v+\pi_2^v+\pi_3^v+\pi_4^v)$
b_{1g}	σ	2	$d_{x^2-y^2}$	$\Phi_2=\frac{1}{2}(\sigma_1-\sigma_2+\sigma_3-\sigma_4)$
b_{2g}	π	2	d_{xy}	$\Phi_{10}=\frac{1}{2}(\pi_1^h-\pi_2^h+\pi_3^h-\pi_4^h)$
b_{2u}	非键	1		$\Phi_6=\frac{1}{2}(\pi_v^1-\pi_2^v+\pi_3^v-\pi_4^v)$
e_g	π	4	d_{xz}, d_{yz}	$\Phi_7=\frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_1^h-\pi_3^h)$, $\Phi_8=\frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_2^h-\pi_4^h)$
e_u	σ, π	6	p_x, p_y	$\Phi_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_1-\sigma_3)$, $\Phi_4=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_2-\sigma_4)$ $\Phi_{11}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_1^h-\pi_3^h)$, $\Phi_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_2^h-\pi_4^h)$

σ 键和 π 键示于图4.4.7. 由上表可以看出 a_{1g}不可约表示解1个3×3久期方程. e_u不可约表示解2个3×3的久期方程, a_{2u}, b_{1g}, b_{eu} 不可约表示均需解2×2久期方程, e_g不可约表示需解2个2×2久期方程. $[PtCl_4]^{2-}$ 分子轨道能级次序正确确定完全依靠计算结果. 假设库仑能量增加的次序为

$$\sigma(\text{配位体})<\pi(\text{配位体})<5d<6s<6p$$

我们可以绘制一个如图4.4.8所示的$[PtCl_4]^{2-}$的简化分子轨道能级图.

$Pt^{2+}(d^8)$贡献8个价电子, 配体Cl贡献6×4=24个价电子, 体系总价电子数为32个. 价电子由最低轨道往上填充, 直到 d_{xy}轨道.

图 4.4.7 σ 键和 π 键示意图

图 4.4.8 $[PtCl_4]^{2-}$ 的分子轨道能级图

4.4.4 D_{5d}对称性分子的对称匹配轨道

二茂铁分子属于 D_{5d}对称性，它由两个 C_5H_5 环和一个 Fe 原子组成. 2 个 C_5H_5 环有 10 个 p_z 轨道，Fe 原子有 $3d$，$4s$，$4p$ 共 9 个原子轨道. 它们的线性组合构成分子点群 D_{5d} 的对称性匹配轨道.

首先考虑 2 个 C_5H_5 的 10 个 p_z 轨道，这 10 个 $p\pi$ 轨道集合在 D_{5d}中产生的可约表示特征标为

D_{5d}	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	i	$2S_{10}$	$2S_{10}^3$	$5\sigma_d$
Γ_π	10	0	0	0	0	0	0	2

由 D_{5d}的特征标表，利用(4.3.9)式，将可约表示分解为不可约表示为

$$\Gamma_\pi = a_{1g} \oplus a_{2u} \oplus e_{1g} \oplus e_{1u} \oplus e_{2g} \oplus e_{2u}$$

考虑中心 Fe 原子的 9 个轨道在 D_{5d}群中的分解，4s 轨道是球形的，属于 a_{1g}，而 p_x，p_y 和 p_z 轨道和 x，y 和 z 的行为相同，分别属于 e_{1u}和 a_{1u}不可约表示，5 个 d 轨道和 x^2-y^2，xy，xz，yz 和 z^2 的行为相同，因此 $d=a_{1g}\oplus e_{1g}\oplus e_{2g}$. 综合上面讨论得到 Fe 原子 9 个轨道分属于下列不可约表示

$$a_{1g}:s,\ d_{z^2};\quad a_{2u}:p_z;\quad e_{1u}:(p_x,\ p_y)$$

$$e_{1g}:(d_{xz}, d_{yz});\quad e_{2g}:(d_{x^2-y^2},\ d_{xy})$$

p 轨道一定属于反对称 u，而 d 轨道一定属于对称的 g. 前者是 x，y，z 的奇次方函数，而后者是 x，y，z 的偶次方函数.

下面讨论配体$(C_5H_5)_2$ 的对称匹配轨道.

对 C_5H_5 的 5 个 π 轨道可构成 $\Psi(a)$，$\Psi(e_1)$，$\Psi(e_2)$，对二茂铁的 a_{1g}和 a_{2u}轨道，利用上、下二个环的 a 表示轨道组合

$$\Psi(a_{1g}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(a) + \Psi_2(a)]$$

$$\Psi(a_{2u}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(a) - \Psi_2(a)]$$

其中下标1和2标记上下环. 利用单个环的 e_1 和 e_2 表示的轨道，按完全相同手法组合可得到 e_{1g}和 e_{1u}，e_{2g}和 e_{2u}的对称匹配轨道，它们为

$$\begin{cases} \Psi(e_{1g}^a) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(e_1^a) + \Psi_2(e_1^a)] \\ \Psi(e_{1g}^b) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(e_1^b) + \Psi_2(e_1^b)] \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Psi(e_{1u}^a) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(e_1^a) - \Psi_2(e_1^a)] \\ \Psi(e_{1u}^b) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(e_1^b) - \Psi_2(e_1^b)] \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Psi(e_{2g}^a) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(e_2^a) + \Psi_2(e_2^a)] \\ \Psi(e_{2g}^b) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(e_2^b) + \Psi_2(e_2^b)] \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Psi(e_{2u}^a) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(e_2^a) - \Psi_2(e_2^a)] \\ \Psi(e_{2u}^b) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(e_2^b) - \Psi_2(e_2^b)] \end{cases}$$

二茂铁包括简并性在内共有19个轨道，19×19久期方程分解成以下较小的久期方程：

3个 a_{1g}：需解1个3×3久期方程；

2个 a_{2u}：需解1个2×2久期方程；

2个 e_{1g}：需解2个2×2久期方程(二者有相同的根)；

2个 e_{1u}：需解2个2×2久期方程(二者有相同的根)；

2个 e_{2g}：需解2个2×2的久期方程(二者有相同的根)；

1个 e_{2u}：由于Fe原子没有 e_{2u}表示，该轨道是非键的.

能级的高低顺序和间隔，具体问题要作具体计算. 采用计算方法不同，得到的能级次序也有所不同. 一个用自洽场方法对二茂铁的具体计算结果如图4.4.9所

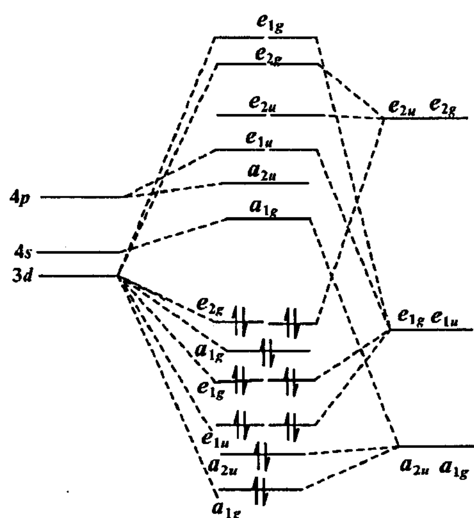


图4.4.9　二茂铁的能级图

示. 由计算结果可以得出二茂铁有 9 个成键轨道，正好被来自环上 10 个电子和 Fe 原子的 8 个价电子所充满，恰恰符合 18 电子规则. 二茂铁基态的电子组态为

$$(1a_{1g})^2(a_{2u})^2(e_{1u})^4(e_{1g})^4(2a_{1g})^2(e_{2g})^4$$

4.4.5 O_h 对称性的正八面体 AB_6 型分子对称匹配轨道

正八面体具有 O_h 对称性的 AB_6 型分子或络离子，在过渡金属化学中，是普遍存在的一类重要化合物或者由它们作为基本单元构成更复杂的化合物. 因此，对 AB_6 型分子的分析具有典型意义.

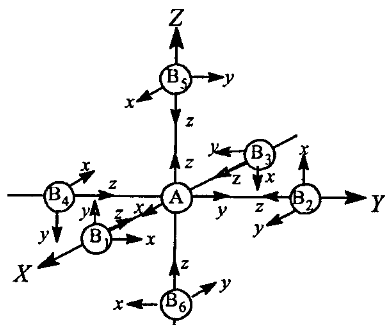


图 4.4.10 AB_6 形分子

首先假定中心原子 A 参与成键的轨道有 s，p 和 d 轨道，而配体原子 B 参与成键的仅为 s 和 p 轨道. 因此在 AB_6 型分子中，中心原子提供 9 个价轨道(s, p, d)，而配体原子提供 $4\times6=24$ 个价轨道，总计有 33 个轨道. AB_6 型分子中的坐标系如图 4.4.10 所示. 中心原子 A 的坐标系是右手规则，6 个 B 原子的坐标系是左手规则. z 坐标指向中心原子 A.

1. 中心原子 A 的 s, p, d 轨道分类

利用 O_h 群的特征标表，中心原子 9 个轨道对称性分类如下：

a_{1g}: s;

e_g: $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2};

t_{1u}: p_x, p_y, p_z;

t_{2g}: d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}.

2. 配位的对称匹配轨道

配位的 24 个原子轨道在 O_h 群中分为三个集合 6 个 s 轨道，6 个 p_z 轨道指向中心 A 原子，其余的为 6 个 p_x 和 6 个 p_y 轨道. 前 12 个轨道和中心原子 A 形成 σ 型键，后 12 个轨道和中心原子 A 形成 π 键.

先讨论成 σ 键轨道，把 6 个 s 轨道和 6 个 p_z 轨道分别记作 $\sigma_i(i=1, 2, \cdots, 6)$二组轨道完全等价. 在 O_h 群对称操作下构成一个 6 维表示，它们的特征标为

O_h	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
Γ_σ	6	0	0	2	2	0	0	0	4	0

上面特征标的得到是由于有 2 个 σ 轨道在四重轴上，在 C_4 作用下，对特征标贡献为 2，同样在 σ_h 平面中有 4 个 σ 轨道，对特征标贡献为 4. 利用(4.3.9)式容易把这个可约表示分解为

$$\Gamma_\sigma = a_{1g} \oplus e_g \oplus t_{1u}$$

利用 O_h 群的投影算子可以得到 a_{1g}，e_g 和 t_{1u}三个不可约表示的对称性匹配轨道. 但这种方法太麻烦. 下面介绍一种利用和中心原子 A 对称性相同轨道相匹配的方法. 要得到配

体属于 a_{1g}对称性的对称匹配轨道，利用中心原子 A 属于 a_{1g}的 s 轨道相匹配，6 个 σ 轨道都有贡献，且系数相同，得到

$$\Psi(a_{1g}) = c_1(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5 + \sigma_6)$$

利用归一化条件确定常数 $c_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}$，代入上式得

$$\Psi(a_{1g}) = \frac{1}{\sqrt{6}}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma_5 + \sigma_6)$$

和中心原子 A 的 e_g 轨道(d_{z^2}, $d_{x^2-y^2}$)相匹配得到轨道

$$\Psi_1(e_g) = c_1(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) + c_2(\sigma_5 + \sigma_6)$$

$$\Psi_2(e_g) = c_3(\sigma_1 - \sigma_2 + \sigma_3 - \sigma_4)$$

对 $\Psi_2(e_g)$用归一化条件确定常数 $c_3 = \frac{1}{2}$，$\Psi_1(e_g)$和 $\Psi(a_{1g})$正交并利用归一化条件，二个方程确定二个常数 $c_1 = -\frac{1}{\sqrt{6}}$，$c_2 = \frac{2}{\sqrt{12}}$，代入上式得

$$\Psi_1(e_g) = \frac{1}{\sqrt{12}}(2\sigma_5 + 2\sigma_6 - \sigma_1 - \sigma_2 - \sigma_3 - \sigma_4)$$

$$\Psi_2(e_g) = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2 + \sigma_3 - \sigma_4)$$

利用中心原子 A 的 t_{1u}轨道(p_x, p_y, p_z)相匹配得到配体属于 t_{1u}的三个对称匹配函数.

$$\Psi_x(t_{1u}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_1 - \sigma_3)$$

$$\Psi_y(t_{1u}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_2 - \sigma_4)$$

$$\Psi_z(t_{1u}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_5 - \sigma_6)$$

3. 配体中 π 键对称匹配轨道

配体 B 原子除 s 和 p_z 轨道和中心原子形成 σ 键外，每个 B 原子还有 p_x，p_y 两个轨道，它们和中心原子形成 π 键，6 个 B 原子共有 12 个 π 轨道. $3C_4^2(3C_2)$轴转动使分子坐标 z 轴二个 B 原子中的 p_x，p_y 变一个负号，对特征标贡献为 −4. σ_h 对称面使该平面中的 p_x^1，p_y^2，p_y^3，p_x^4 不动，对特征标贡献为 4，但 p_y^1，p_x^2，p_x^3，p_y^4 在 σ_h 作用下变一个符号，对特征标贡献为 −4，二者之和特征标为 0. 因此 AB_6 型分子的 12 个 π 轨道构成 O_h 群的一个可约表示，这个表示的特征标为

O_h	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$3S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
Γ_π	12	0	0	0	−4	0	0	0	0	0

利用(4.3.9)式，上面的可约表示分解为不可约表示

$$\Gamma_\pi = t_{1g} \oplus t_{1u} \oplus t_{2g} \oplus t_{2u}$$

由于中心原子 A 和 s，p，d 轨道中没有与 t_{1g}和 t_{2u}不可约表示相匹配的轨道，π 键的

这些轨道是非键的. 对于t_{2g}和t_{1u}，分别有(d_{xy}, d_{xz}, d_{yz})和(p_x, p_y, p_z)可以相匹配，但考虑到σ键的键强，p轨道特别有利于先形成强σ键. 所以只剩下三个t_{2g}不可约表示构成A—B型的π键，即三个π键平均分配在六个A—B键之间. 为了得到t_{2g}不可约表示，利用中心原子A的t_{2g}(d_{xy}, d_{xz}, d_{yz})相匹配得到配体的属于t_{2g}的对称匹配轨道. 匹配图形示于图4.4.11中.

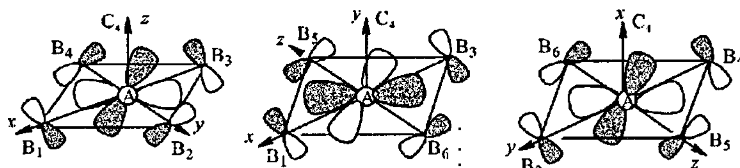


图4.4.11 对称性为t_{2g}的匹配轨道

由此得

$$\Psi_1(t_{2g}) = \frac{1}{2}(p_x^1 + p_y^2 + p_y^3 + p_x^4)$$

$$\Psi_2(t_{2g}) = \frac{1}{2}(p_y^1 + p_x^3 + p_x^5 + p_y^6)$$

$$\Psi_3(t_{2g}) = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^4 + p_y^5 + p_x^6)$$

剩下的t_{1u}，t_{2u}和t_{1g}的对称匹配轨道是非键的. 完整的AB_6型分子的分子轨道能级图示于图4.4.12. 当B是充满电子的配体，它比金属t_{2g}轨道能量低，这些π轨道使配体降低了金属t_{2g}轨道的稳定性，而且使部分配体π电子转移到金属原子. 当配体具有空轨道能量比金属t_{2g}要高的配体，如CO，NO和膦基等，它们稳定金属t_{2g}轨道，配体接收d轨道部分电子.

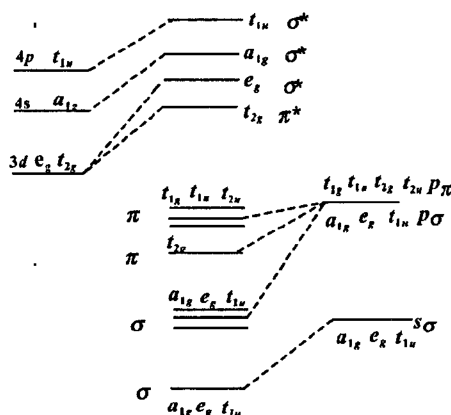


图4.4.12 AB_6型分子轨道能级图

4.4.6 T_d对称性的正四面体AB_4型分子对称匹配轨道

(1)中心原子A的s, p, d轨道分类

利用T_d群的特征标表，中心原子的9个轨道对称性分类如下：

a_1: s;

e : d_{z^2}, $d_{x^2-y^2}$;

t_2: (p_x, p_y, p_z)和(d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}).

配体B原子的s轨道和p_z轨道属于和中心原子形成σ键轨道，另外剩下8个π轨道，它们所构成T_d群表示的特征标如下：

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$
Γ_σ	4	1	0	0	3
Γ_π	8	−1	0	0	0

用(4.3.9)式分解得

$$\Gamma_\sigma = a \oplus e$$

$$\Gamma_\pi = e \oplus t_1 \oplus t_2$$

从中心原子 A 的分类看，没有 t_1 表示，有 2 组 t_2 型轨道，所以可能同时有 t_2 对称性的 σ 和 π 分子轨道. 因此不可能形成一组完全的 π 键.

配体的 σ 轨道 s^i, $p_z^i(i=1, 2, 3, 4)$ 记为 $\Phi_i(i=1, 2, 3, 4)$,

$$\Psi_\sigma(a) = \frac{1}{2}(\Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4)$$

$$\Psi(e) = \begin{cases} \frac{1}{2}(p_x^1 - p_x^2 - p_x^3 + p_x^4) \\ \frac{1}{2}(p_y^1 - p_y^2 - p_y^3 + p_y^4) \end{cases}$$

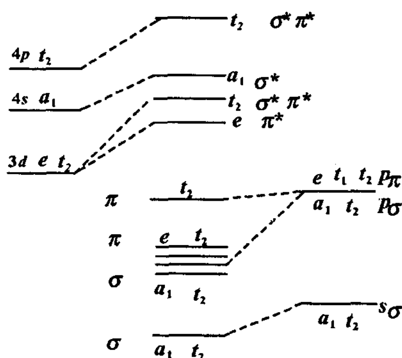


图 4.4.13　MCl_4^{2-} 的能级图

e 表示轨道是和中心原子的 d_{z^2} 和 $d_{x^2-y^2}$ 相匹配得到的.

$$\Psi_\sigma(t_2) = \begin{cases} \frac{1}{2}(\Phi_1 - \Phi_2 + \Phi_3 - \Phi_4) \\ \frac{1}{2}(\Phi_1 + \Phi_2 - \Phi_3 - \Phi_4) \\ \frac{1}{2}(\Phi_1 - \Phi_2 - \Phi_3 + \Phi_4) \end{cases}$$

t_2 表示的 σ 轨道是和中心原子的 p_x, p_y 和 p_z 轨道相匹配.

$$\Psi_\pi(t_2) = \begin{cases} \frac{1}{4}(p_x^1 + p_x^2 - p_x^3 - p_x^4) + \frac{\sqrt{3}}{4}(-p_y^1 - p_y^2 + p_y^3 + p_y^4) \\ \frac{1}{4}(p_x^1 - p_x^2 + p_x^3 - p_x^4) + \frac{\sqrt{3}}{4}(p_y^1 - p_y^2 + p_y^3 - p_y^4) \\ \frac{1}{2}(p_x^1 + p_x^2 + p_x^3 + p_x^4) \end{cases}$$

t_2 表示的 π 轨道是中心原子 d_{xz}, d_{yz} 和 d_{xy} 轨道相匹配. 图 4.4.13 给出第一过渡金属氯化物 MCl_4^{2-} 的能级示意图.

4.5　原子轨道和杂化轨道

4.5.1　原子轨道的变换性质

在中心力场模型下原子轨道可表示为

$$\Psi_{nlm}(r) = R_n(r) Y_{lm}(\theta, \psi) \tag{4.5.1}$$

其中 n 称为主量子数，l 称为角量子数，它在群论意义上表示这个轨道对于 $SO(3)$ 群的对称性，即 $SO(3)$ 群的不可约表示，在物理意义上为轨道角动量，m 在群论上为不可约表示 l 的权，或者说 $SO(3)$ 群不可约表示 l 的分量，$m = l, l-1, \cdots, 0, -1, -2, \cdots, -(l-1), -l$，对一定 l，m 允许的取值为 $2l+1$ 个(详细讨论本书第十一章)，物理上表

示轨道角动量在 z 轴上的投影，又称磁量子数. 称 $R_n(r)$ 为原子轨道的经向部分，也称为径向波函数，$Y_{lm}(\theta,\psi)$ 是原子轨道的角度部分，它是球谐函数. $R_n(r)$ 和 Y_{lm} 是分别归一化的，即

$$\int_0^{\infty} R_n(r)^* R_n(r) r^2 \mathrm{d}r = 1$$

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_{lm}(\theta,\psi) Y_{lm}^*(\theta,\psi) \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\psi = 1$$

显然 $R_n(r)$ 对所有点群操作都是不变的，因而波函数的角度对称性完全由 $Y_{lm}(\theta,\psi)$ 决定. $l=0$ 的轨道与角度无关，具有球对称性，称为 s 轨道. $l=1$ 的轨道有三个分量，称为 p 轨道；$l=2$ 的轨道有 5 个分量，称为 d 轨道；$l=3$ 的轨道有 7 个分量，称为 f 轨道. 在一般的分子中这 4 个原子轨道是足够用了. 一般原子 A 为金属原子，包括 $l=2$ 轨道的为过渡金属原子；包括 $l=3$ 的为稀土原子. 下面给出这些轨道的角度函数，$Y_{lm}(\theta,\psi)$ 和 $r^l Y_{lm}(\theta,\psi)$ 的表.

球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\psi)$，$l=0, 1, 2, 3$

l	m	$r^l Y_{lm}(\theta,\psi)$	$Y_{lm}(\theta,\psi)$
	0	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}z$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
	±1	$\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x\pm \mathrm{i}y)$	$\pm\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm \mathrm{i}\psi}$
2	0	$\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{4}}(3z^2-r^2)$	$\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{4}}(3\cos^2\theta-1)$
	±1	$\mp\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{3}{2}}z(x\pm \mathrm{i}y)$	$\mp\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm \mathrm{i}\psi}$
	±2	$\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{3}{8}}(x\pm \mathrm{i}y)^2$	$\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta e^{\pm \mathrm{i}2\psi}$
3	0	$\sqrt{\frac{7}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{4}}z(5z^2-2r^2)$	$\sqrt{\frac{7}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{4}}(2\cos^3\theta-3\cos\theta\sin\theta)$
	±1	$\mp\sqrt{\frac{7}{4\pi}}\sqrt{\frac{3}{16}}(x\pm \mathrm{i}y)(5z^2-2r^2)$	$\mp\sqrt{\frac{7}{4\pi}}\sqrt{\frac{3}{16}}(4\cos^2\theta\sin\theta-\sin^3\theta)e^{\pm \mathrm{i}\psi}$
	±2	$\sqrt{\frac{7}{4\pi}}\sqrt{\frac{15}{8}}z(x\pm \mathrm{i}y)^2$	$\sqrt{\frac{7}{4\pi}}\sqrt{\frac{15}{8}}\cos\theta\sin^2\theta e^{\pm 2\mathrm{i}\psi}$
	±3	$\mp\sqrt{\frac{7}{4\pi}}\sqrt{\frac{5}{16}}(x\pm \mathrm{i}y)^3$	$\mp\sqrt{\frac{7}{4\pi}}\sqrt{\frac{5}{16}}\sin^3\theta e^{\pm 3\mathrm{i}\psi}$

球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\psi)$ 是复函数，有时使用实函数更方便，因而定义 Y_{lm_s} 为 Y_{lm} 的虚部，Y_{lm_c} 为 Y_{lm} 的实部，下面列出了常用的 $l=0,1,2$ 的函数 Y_{lm_c} 和 Y_{lm_s}.

$$Y_{0,0}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}}=s$$

$$Y_{1,0}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}=p_z$$

$$Y_{1,1c}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\psi=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r}=p_x$$

$$Y_{1,1s}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\psi=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{y}{r}=p_y$$

$$Y_{2,0}=\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{4}}(3\cos^2\theta-1)=\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{4}}\frac{2z^2-x^2-y^2}{r^2}=d_{z^2}$$

$$Y_{2,1c}=\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\psi=\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{xz}{r^2}=d_{xz}$$

$$Y_{2,1s}=\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\psi=\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{yz}{r^2}=d_{yz}$$

$$Y_{2,2c}=\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{4}}\sin^2\theta\cos^2\psi=\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{4}}\frac{x^2-y^2}{r^2}=d_{x^2-y^2}$$

$$Y_{2,2s}=\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{4}}\sin^2\theta\sin^2\psi=\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sqrt{\frac{1}{4}}\frac{xy}{r^2}=d_{xy}$$

这就是平常所说的 s，p 和 d 轨道. 当若干个 B 原子与 A 原子形成分子时，分子 AB_n 具有一定点群 G 的对称性，这些原子的原子轨道将构成对称点群 G 的不可约表示的基矢，从而简化求解本征方程.

当若干个 B 原子与 A 原子形成分子时，分子 AB_n 具有一定点群 G 的对称性，这些原子的原子轨道将构成对称点群 G 的不可约表示的基矢，从而简化求解本征方程.

4.5.2　杂化轨道理论

杂化轨道理论是由鲍林(Pauling)和斯莱特(Slater)两人在 19 世纪 30 年代初提出来的，最先用碳原子的 sp^3 轨道杂化理论成功地解释了甲烷(CH_4)正四面体构型，鲍林把杂化理论扩展到 d 轨道，用 sp^3d^2 杂化轨道成功地解释了 $PtCl_6^{2-}$，$Fe(CN)_6^{3-}$ 等络离子的结构. 杂化轨道理论认为中心原子的原子轨道可以重新组合成为一些新的原子轨道，原子轨道的这种重新组合称为杂化. 杂化后的原子轨道称为杂化轨道. 唐敖庆教授提出统一处理 s-p-d-f 参与的杂化轨道理论，并给出了杂化轨道的一般构造方法.

杂化轨道理论要解决两个问题，首先在确定分子对称群 G 下，中心原子的哪些轨道参与杂化，即构成什么样的杂化轨道类型. 其次求得杂化轨道的具体表示形式.

4.5.3　群论的处理方法

在确定的分子对称群 G 下，一组有方向键具有一定的空间对称图形，在群 G 的对称操作下，这组有方向键构成群 G 的一个表示. 我们把几个方向键看作 n 个基矢量，$(\Phi_1, \Phi_2, \cdots, \Phi_n)$，把群 G 的对称操作 R 作用到这些基矢量上，得到

$$R\begin{pmatrix}\Phi_1\\ \Phi_2\\ \vdots\\ \Phi_n\end{pmatrix}=D(R)\begin{pmatrix}\Phi_1\\ \Phi_2\\ \vdots\\ \Phi_n\end{pmatrix}$$

上式中的 $D(R)$ 是群 G 的对称操作 R 的表示矩阵. 容易证明，集合 $D(R)$，R 为群 G 中的对称操作，可做成群 G 的一个表示，一般这个表示是可约表示. 根据(4.3.9)式可把这个可约表示分解成为一些不可约表示的直和.

我们知道原子轨道也可以作为基矢构成一个表示，由于对称操作 R 和薛定谔算符 H 是可交换的，有

$$HR\psi=RH\psi=ER\psi$$

上式表明，若 ψ 是薛定谔方程的解，$R\psi$ 也是它的解，因此

$$R\psi_\nu=\sum_\mu \Gamma(R)_{\mu\nu}\psi_\mu$$

这一套 Γ 矩阵也就是群 G 的一个表示，利用(4.3.9)式它也可以分解为一些不可约表示的直和. 在这些不可约表示中，组合出和表示 D 具有相同特征标的表示，我们就找到了和 D 等价的另一表示. 则向量 ψ 和 Φ 之间，可以用原子轨道 ψ 的线性组合来表达 n 个方向键 Φ_i，$i=1, 2, \cdots, n$，

$$\Phi_i=\sum_k C_{ik}\psi_k$$

4.5.4 常见几何构型杂化轨道

1. D_{3h} 构型的杂轨道

平面的 AB_3 分子均属于 D_{3h} 对称群. 中心原子 A 参与杂化的原子轨道有 s, p, d 共9个原子轨道. 形成的3个 σ 键(方向键)在 D_{3h} 群中的可约表示为

D_{3h}	E	$3C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
Γ_σ	3	0	1	3	0	1

利用(4.3.9)式，这个可约表示分解为

$$\Gamma_\sigma=A_1'\oplus E'$$

由 D_{3h} 群的特征标表可得到

$$A_1':\ s,\ d_{z^2}$$

$$E':\ (p_x,\ p_y),\ (d_{x^2-y^2},\ d_{xy})$$

因此，所有的可能杂化轨道类型只有4种：

$$sp^2, d^2s,\ dp^2,\ d^3$$

具体采用哪一种杂化轨道要由原子轨道的能级高低来决定，对 BF_3，NO_3^- 等分子和离子形成 sp^2 杂化轨道，对 MCl_3(M 为过渡金属)分子用 $(n-1)$ 个 dns 轨道形成 d^2s 杂化轨道. 对 sp^2 杂化轨道，可以求得杂化轨道的具体函数形式. 利用和中心原子 s 和 p_x，p_y 相匹配的方法很容易求得杂化轨道 Φ_1，Φ_2，Φ_3(见图4.5.1). 和中心原子的 s 轨道相匹

配，三个杂化轨道系数一定相等，再利用归一化求出系数为$\frac{1}{\sqrt{3}}$，即

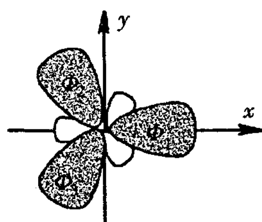


图 4.5.1　sp^2 杂化轨道

$$s=\frac{1}{\sqrt{3}}(\Phi_1+\Phi_2+\Phi_3)$$

和中心原子的 p_x 轨道相匹配，有

$$p_x=c_1\Phi_1+c_2(\Phi_2+\Phi_3)$$

利用归一化条件和 p_x 轨道与 s 轨道正交，求得 c_1 和 c_2.

$$p_x=\frac{2}{\sqrt{6}}\Phi_1-\frac{1}{\sqrt{6}}\Phi_2-\frac{1}{\sqrt{6}}\Phi_3$$

和中心原子的 p_y 轨道相匹配，并利用归一化条件得

$$p_y=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_2-\Phi_3)$$

上面三式用矩阵表示，有

$$\begin{pmatrix}s\\p_x\\p_y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}&\frac{1}{\sqrt{3}}&\frac{1}{\sqrt{3}}\\\frac{2}{\sqrt{6}}&-\frac{1}{\sqrt{6}}&-\frac{1}{\sqrt{6}}\\0&\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Phi_1\\\Phi_2\\\Phi_3\end{pmatrix}=U\begin{pmatrix}\Phi_1\\\Phi_2\\\Phi_3\end{pmatrix}$$

利用 U^{-1}乘上式两端，得 sp^2 的三个杂化轨道函数

$$\begin{pmatrix}\Phi_1\\\Phi_2\\\Phi_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}&\frac{2}{\sqrt{6}}&0\\\frac{1}{\sqrt{3}}&-\frac{1}{\sqrt{6}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{3}}&-\frac{1}{\sqrt{6}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}s\\p_x\\p_y\end{pmatrix}$$

2. 正四面体杂化轨道

正四面体 AB_4 分子有 CH_4，MnO_4^{-1} 等，属于 T_d 对称群. 4 个 σ 键在 T_d 群中的可约表示特征标为

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$
Γ_σ	4	1	0	0	2

利用(4.3.9)式，Γ_σ 分解不可约表示为

$$\Gamma_\sigma=A_1\oplus T_2$$

由 T_d 群的特征标表得

$$A_1:\ s$$
$$T_2:\ (p_x,\ p_y,\ p_z),\ (d_{xy},\ d_{xz},\ d_{yz})$$

可能的杂化轨道类型有 sp^3 和 sd^3 两种. 对 CH_4 分子, 由于碳原子的 s, p 轨道能量接近, 采用 sp^3 杂化. 对 MnO_4^{-1} 分子, 由于锰原子 $3d^54s^2$ 组态, 可能采用 sd^3 杂化. 利用和中心原子 s, p_x, p_y 和 p_z 相匹配的方法可以得到 sp^3 杂化轨道. 中心原子轨道 s, p 如图 4.5.2 所示.

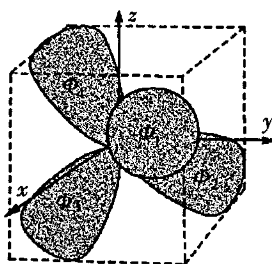


图 4.5.2 中心原子 s, p 轨道

s, p 轨道和杂化轨道之间的变换矩阵关系如下:

$$\begin{pmatrix} s \\ p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{pmatrix}$$

利用 U^{-1} 乘上式两端, 得到 sp^3 的四个杂化轨道函数

$$\begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s \\ p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$$

3. 平面正方形杂化轨道

平面正方形 AB_4 分子有 $AgCl_4^{3-}$, $CuCl_4^{2-}$, XeF_4, $Ni(CN)_4^{2-}$ 等, 它们属于 D_{4h}. 4 个 σ 键在 D_{4h} 群中的可约表示

D_{4h}	E	$2C_4$	$2C_2$	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ_σ	4	0	0	2	0	0	0	4	2	0

利用(4.3.9)式, Γ_σ 分解不可约表示为

$$\Gamma_\sigma = A_{1g} \oplus B_{1g} \oplus E_u$$

由 D_{4h} 群的特征标表得

$$A_{1g}: s,\ d_{z^2}$$

$$B_{1g}: d_{x^2-y^2}$$

$$E_u: (p_x,\ p_y)$$

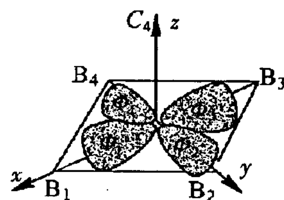


图 4.5.3 dsp^2 杂化轨道

可能的杂化轨道类型有 dsp^2 和 d^2p^2 两种. dsp^2 的四个杂化轨道如图 4.5.3 所示. 利用和中心原子 s, $d_{x^2-y^2}$, p_x 和 p_y 相匹配的方法可以得到 dsp^2 的杂化轨道函数. s, $d_{x^2-y^2}$, p_x 和 p_y 与杂化轨道之间的变换矩阵关系如下:

$$\begin{pmatrix} s \\ d_{x^2-y^2} \\ p_x \\ p_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{pmatrix}$$

利用 U^{-1} 乘上式两端，得到 dsp^2 四个杂化轨道：

$$\begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s \\ d_{x^2-y^2} \\ p_x \\ p_y \end{pmatrix}$$

4. 三角双锥形杂化轨道

三角双锥型分子有 PF_5，AsF_5，$MoCl_5$，$Fe(CO)_5$ 等，这类分子属于 D_{3h} 群. 5 个 σ 键在 D_{3h} 群的可约表示特征标为

D_{3h}	E	$2C_3$	$2C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
Γ_σ	5	2	1	3	0	3

利用(4.3.9)式，Γ_σ 分解不可约表示为

$$\Gamma_\sigma = 2A_1' \oplus A_2'' \oplus E'$$

由 D_{3h} 群的特征标表得

$$A_1':\ s,\ d_{z^2};\quad A_2'':\ p_z;\quad E':\ (p_x, p_y),\ (d_{x^2-y^2}, d_{xy})$$

可能的杂化轨道类型有 dsp^3 和 d^3sp 两种，PF_5 和 AsF_5 分子属于 dsp^3 杂化，$MoCl_5$ 分子属于 d^3sp 杂化.

5. 正八面体杂化轨道

正八面体 AB_6 分子有 SF_6，CoF_6^{3-}，$PtCl_6^{2-}$，$Fe(CN)_6^{3-}$ 和 $Cr(CO)_6$ 等，它们属于 O_h 群. 6 个 σ 键在 O_h 群中的可约表示可用它的子群 O 群来研究. 6 个 σ 键在 O 群中的可约表示为

O	E	$6C_4$	$3C_2$	$8C_3$	$6C_2$
Γ_σ	6	2	2	0	0

利用(4.3.9)式，Γ_σ 在 O 群分解不可约表示为

$$\Gamma\sigma = A_1 \oplus E \oplus T_1$$

从 O 群的特征标表得

O 群			O_h 群
A_1:	s	$\longrightarrow$	A_{1g}
E:	$(d_{z^2}, d_{x^2-y^2})$	$\longrightarrow$	E_g
T_1:	(p_x, p_y, p_z)	$\longrightarrow$	T_{1u}

所以在 O_h 群中，中心原子只可能有一种杂化轨道 d^2sp^3，杂化轨道如图 4.5.4 所示. 和中心原子 s 轨道相匹配的 6 个 σ 键系数相等，再利用归一化得

$$s=\frac{1}{\sqrt{6}}(\Phi_1+\Phi_2+\Phi_3+\Phi_4+\Phi_5+\Phi_6)$$

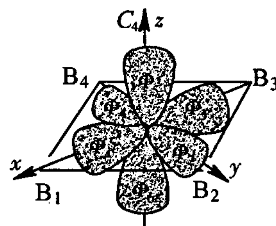


图 4.5.4 d^2sp^3 杂化轨道

和中心原子 p 轨道相匹配的 3 个杂化轨道

$$p_x=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_1-\Phi_3)$$

$$p_y=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_2-\Phi_4)$$

$$p_z=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_5-\Phi_6)$$

和中心原子 $d_{x^2-y^2}$ 相匹配的只有 Φ_1，Φ_2，Φ_3，Φ_4 杂化轨道. 再利用归一化，得

$$d_{x^2-y^2}=\frac{1}{2}(\Phi_1-\Phi_2+\Phi_3-\Phi_4)$$

和 d_{z^2} 相匹配的杂化轨道为

$$d_{z^2}=c_1(\Phi_1+\Phi_2+\Phi_3+\Phi_4)+c_2(\Phi_5+\Phi_6)$$

上式中二个系数可利用归一化和 s 轨道相正交得到二个方程，确定二个系数，$c_1=-\frac{1}{\sqrt{12}}$，$c_2=\frac{1}{\sqrt{3}}$，原子轨道和杂化轨道之间的交换矩阵关系如下：

$$\begin{pmatrix} s \\ p_x \\ p_y \\ p_z \\ d_{z^2} \\ d_{x^2-y^2} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \\ \Phi_6 \end{pmatrix}=U\begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \\ \Phi_6 \end{pmatrix}$$

利用 U^{-1} 乘上式两端，得到 d^2sp^3 的六个杂化轨道函数

$$\begin{pmatrix}\Phi_1\\\Phi_2\\\Phi_3\\\Phi_4\\\Phi_5\\\Phi_6\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{2}\\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{1}{2}\\ \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0\\ \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}s\\p_x\\p_y\\p_z\\d_{z^2}\\d_{x^2-y^2}\end{pmatrix}$$

6. f 轨道参与的杂化轨道

以 $MoSi_2$ 的晶体结构为例，讨论 f 轨道参与的杂化轨道. Mo 原子的周围有十根 Mo—Si 键，属于 D_{4h} 对称群，其结构示于图 4.5.5. 在 $MoSi_2$ 晶体结构中，通常认为 Mo—S 是共价键. 而硅的电负性是 1.8，比 S 的电负性 2.5 更小. 因此，可以认为 $MoSi_2$ 也是共价键. 10 个 σ 键在 D_{4h} 群中的可约表示为

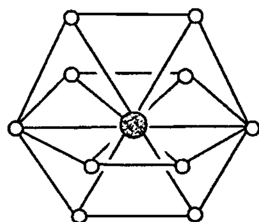


图 4.5.5　$MoSi_2$ 的晶体结构

D_{4h}	E	$2C_4$	$2C_2$	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ_σ	10	2	2	0	0	0	0	6	2	0

利用(4.3.9)式，Γ_σ 分解不可约表示为

$$\Gamma_\sigma = 2A_{1g}\oplus 2A_{2u}\oplus B_{1g}\oplus B_{2u}\oplus E_g\oplus E_u$$

由 D_{4h} 群的特征标表，可得

A_{1g}：s，d_{z^2}；

A_{2u}：p_z，$f_{z(5z^2-3)}$；

B_{1g}：d_{xy}；

B_{2u}：f_{xyz}；

E_g：(d_{xz}, d_{yz})；

E_u：(p_x, p_y)；$(f_{x(5z^2-1)}, f_{y(5z^2-1)})$.

f 轨道是三次方函数，由上面结果看，B_{2u} 不可约表示仅有 f 轨道，A_{2u} 有一个 p 和一个 f 轨道，所以至少要有两个 f 轨道用于 $MoSi_2$ 晶体的杂化轨道，这个杂化轨道类型为 $d^4sp^3f^2$.

第五章　空间群

本章首先给出空间群的定义，然后讨论空间群的7个系列，14种空间点阵类型和32类230个空间群．详细讨论了230个空间群的结构，并把空间群通过周期性边界条件变为有限群．最后引入时间反演把空间群推广为Shubnikov群，对三类磁空间群(或色空间群)做了简要说明．

5.1　空间群与Bravais点阵

5.1.1　Euclide群

定义有两点间距离的n维实空间为n维Euclide空间($\mathbf{R}^n$)．我们生活的现实空间是三维Euclide空间$\mathbf{R}^3$，两点$X(x_1, x_2, x_3)$和$Y(y_1, y_2, y_3)$间的距离为

$$\rho(X, Y) = \left[\sum_{i=1}^{3} (x_i - y_i)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.1.1}$$

在Euclide空间$\mathbf{R}^3$中定义非齐次线性变换$\hat{P}(\hat{\alpha}, \boldsymbol{t})$，它对空间中任意一点$X(x_1, x_2, x_3)$的作用为把它变换为点$X'(x_1', x_2', x_3')$，即

$$\hat{P}(\hat{\alpha}, \boldsymbol{t})X = X'$$

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{pmatrix} = \hat{\alpha} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \boldsymbol{t}, \quad x_i' = \sum_j \alpha_{ij} x_j + t_i \tag{5.1.2}$$

如果要求非齐次线性变换$\hat{P}(\hat{\alpha}, \boldsymbol{t})$保持两点间距离不变，即

$$\rho(X, Y) = \rho(X', Y') \tag{5.1.3}$$

由(5.1.2)得到

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{3} (x_i' - x_i')^2 &= \sum_{i=1}^{3} \left[\left(\sum_j \alpha_{ij} x_j \right)^2 - \left(\sum_j \alpha_{ij} y_j \right)^2 \right] \\ &= \sum_{jk} \left[\left(\sum_i \alpha_{ij} \alpha_{ik} \right) (x_j x_k - y_j y_k) \right] \end{aligned} \tag{5.1.4}$$

因而要求

$$\sum_i \alpha_{ij} \alpha_{ik} = \delta_{jk}, \quad \sum_i \alpha_{ji} \alpha_{ki} = \delta_{jk} \tag{5.1.5}$$

即$\hat{\alpha}$为正交矩阵．

Seitz引入一种描写这种非齐次线性变换的符号

$$\hat{P}(\hat{\alpha}, \boldsymbol{t}) = \{ \hat{\alpha} | \boldsymbol{t} \} \tag{5.1.6}$$

$\boldsymbol{t}$为平移的向量．这种符号已成为目前固体物理中关于空间群的通用符号．由定义可看

出两个变换之积为

$$\{\hat{\alpha}_2|\boldsymbol{t}_2\}\cdot\{\hat{\alpha}_1|\boldsymbol{t}_1\}=\{\hat{\alpha}_2\hat{\alpha}_1|\hat{\alpha}_2\boldsymbol{t}_1+\boldsymbol{t}_2\} \tag{5.1.7}$$

由于正交矩阵之积还是正交矩阵，因而两个变换之积仍然保持空间两点间距离不变. 容易看到这种乘法是满足结合律的. 变换$\{\hat{\alpha}_1|\boldsymbol{t}_1\}$的逆为

$$\{\hat{\alpha}_1|\boldsymbol{t}_1\}^{-1}=\{\hat{\alpha}_1^{-1}|-\hat{\alpha}_1^{-1}\boldsymbol{t}_1\} \tag{5.1.8}$$

单位变换为$\{\hat{e}|=\boldsymbol{0}\}$，$\hat{e}$为单位矩阵. 因而这些非奇次线性变换构成一个群.

定义 5.1.1(Euclide 群)　R_3空间中全部保持两点间距离不变的非齐次线性变换$\{\hat{\alpha}|\boldsymbol{t}\}$构成一个群，称为 Euclide 群，记为$E^3$，也称为实仿射变换群.

当$\boldsymbol{t}=\boldsymbol{0}$时，$\{\hat{\alpha}|\boldsymbol{0}\}$为三维空间正交群$O(3)$，因而$O(3)$群是$E^3$的子群. 当$\hat{\alpha}=\hat{e}$时，$\{\hat{e}|\boldsymbol{t}\}$为$\mathbf{R}^3$空间中的平移群$T$，$T$也是$E^3$群的子群，$E^3$群是连续群，平移向量$\boldsymbol{t}$和正交变换$\hat{\alpha}$都是连续变化的.（为了符号简单以后用$\alpha$代替$\hat{\alpha}$）.

E^3的平移子群T，它的元素为$\{e|\boldsymbol{t}\}$，显然是一 Abel 群，即

$$\{e|\boldsymbol{t}_1\}\cdot\{e|\boldsymbol{t}_2\}=\{e|\boldsymbol{t}_1+\boldsymbol{t}_2\},\quad \{e|\boldsymbol{t}_2\}\cdot\{e|\boldsymbol{t}_1\}=\{e|\boldsymbol{t}_2+\boldsymbol{t}_1\}$$

为一向量加法群，$\boldsymbol{t}_1+\boldsymbol{t}_2=\boldsymbol{t}_2+\boldsymbol{t}_1$.

如果对T群中的平移向量$\boldsymbol{t}$加以约束，即令

$$\|\boldsymbol{t}\|\geqslant\|\boldsymbol{d}\|\quad(\boldsymbol{d}\neq\boldsymbol{0}),\quad \boldsymbol{t}\in T \tag{5.1.9}$$

则得到平移群T的一个分立子群，记为$\bar{T}$，下面证明这一定理.

定理 5.1.1　如果对连续平移群T中的平移向量$\boldsymbol{t}$加以约束，使所有可能的平移向量$\boldsymbol{t}$的长度均大于或等于一个向量$\boldsymbol{d}$的长度$\|\boldsymbol{d}\|$，而$\boldsymbol{d}\neq\boldsymbol{0}$，则得到$T$的一个分立子群，记为$\bar{T}$，$\bar{T}$中的元素为

$$\boldsymbol{t}=m_1\boldsymbol{a}_1+m_2\boldsymbol{a}_2+m_3\boldsymbol{a}_3,\quad m_1,m_2,m_3=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots \tag{5.1.10}$$

$\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$为三个线性无关的向量，称为基向量. 有的书也称分立平移群为格群(lattice group)

证明　在平移群T的子群$\bar{T}$中任意取两个不相平行的向量$\boldsymbol{b}_1$和$\boldsymbol{b}_2$，它们构成一个平面b_{12}，令$\boldsymbol{a}_1$是$\bar{T}$群在平面b_{12}上，而且是与$\boldsymbol{b}_1$平行的最小向量(因为$\bar{T}$中的平移向量长度均大于或等于$\|\boldsymbol{d}\|$，所以存在最小向量，而且$\boldsymbol{a}_1\neq\boldsymbol{0}$). 平面$b_{12}$上可找到一个不与$\boldsymbol{a}_1$平行的平移群$\bar{T}$中的向量$\boldsymbol{a}_2$，使它在平面$b_{12}$上与$\boldsymbol{a}_1$垂直的直线上的投影最小. 因而由$\boldsymbol{a}_1$和$\boldsymbol{a}_2$构成平面$b_{12}$上的平行四边形内部及边上不存在属于$\bar{T}$群的平移向量$\boldsymbol{t}$的端点. 否则如果存在$\bar{T}$中平移向量的端点，则这些向量在$\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$上的投影均小于$\|\boldsymbol{a}_1\|$和$\|\boldsymbol{a}_2\|$. 这与$\|\boldsymbol{a}_1\|$，$\|\boldsymbol{a}_2\|$是最小的假设相矛盾.

下面讨论平移群$\bar{T}$在平面b_{12}以外的平移向量，由于平移群$\bar{T}$的平移向量的有限性，总可在平面b_{12}之外，找到一个$\bar{T}$内的平移向量$\boldsymbol{a}_3$，它在平面b_{12}的法线上的投影最小. 由这三个向量$\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$构成一个平行六面体，容易看到$\bar{T}$群的所有平移向量的端点只能在这个平行六面体之外，或者为这个平行六面体的顶点. 因而$\bar{T}$中的所有平移向

量都可写为这三个线性无关的向量的线性组合，即

$$\boldsymbol{a}=\alpha_1\boldsymbol{a}_1+\alpha_2\boldsymbol{a}_2+\alpha_3\boldsymbol{a}_3,\quad \boldsymbol{a}\in\bar{T} \tag{5.1.11}$$

以 m_1, m_2, m_3 标记 α_1, α_2, α_3 中的整数部分，即 $\alpha_i=m_i+k_i$, $|k_i|<1$. 由于 $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ 是 $\bar{T}$ 中的平移元素，$\bar{T}$ 是向量加法群，因而

$$\boldsymbol{a}_0=m_1\boldsymbol{a}_1+m_2\boldsymbol{a}_2+m_3\boldsymbol{a}_3\quad (m_1,\ m_2,\ m_3\ \text{为任意正负整数})$$

也是 $\bar{T}$ 中的平移向量. 于是(5.1.11)定义的平移向量 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{a}_0$ 之差

$$\boldsymbol{a}-\boldsymbol{a}_0=k_1\boldsymbol{a}_1+k_2\boldsymbol{a}_2+k_3\boldsymbol{a}_3$$

也是 $\bar{T}$ 内的平移向量，而这个向量由于 k_1, k_2, k_3 都是小于 1 的数，因而当 k_1, k_2, k_3 中有一个不为零时，向量 $\boldsymbol{a}-\boldsymbol{a}_0$ 的端点就落在了前述的平行六面体之内(或边界上)，前面已经论述了这是不允许的，因而只能 $k_1=k_2=k_3=0$. 于是

$$\begin{aligned}\{e\mid \boldsymbol{R}_n\}&=\{e\mid m_1\boldsymbol{a}_1+m_2\boldsymbol{a}_2+m_3\boldsymbol{a}_3\}\\&=\{e\mid \boldsymbol{a}_1\}^{m_1}\cdot\{e\mid \boldsymbol{a}_2\}^{m_2}\cdot\{e\mid \boldsymbol{a}_3\}^{m_3}\end{aligned} \tag{5.1.12}$$

平移向量为

$$\boldsymbol{R}_n=m_1\boldsymbol{a}_1+m_2\boldsymbol{a}_2+m_3\boldsymbol{a}_3 \tag{5.1.13}$$

这就证明了这个定理. 对于分立平移群 $\bar{T}$，可以任意选取 $\bar{T}$ 中的三个 $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, $\boldsymbol{x}_3$ ($\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, $\boldsymbol{x}_3\in\bar{T}$)构成一个平行六面体，在所有这些平行六面体中选取最小的平行六面体构成 $\bar{T}$ 群的元胞，这个元胞的三个边上的向量 $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ 构成一组基向量，因而基向量是可以不同选取的，但是元胞的体积$(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2)\cdot\boldsymbol{a}_3$ 是由(5.1.9)式中的最小向量 $\boldsymbol{d}$ 限定的了，因而是唯一确定的.

有了分立平移群，就可在此基础上讨论空间群了.

5.1.2 空间群与 Bravais 点阵

定义 5.1.2(空间群) 如果 Enclide 群 E^3 的平移子群 T 为分立平移群 $\bar{T}$ 时，所得到的 E^3 群的子群为空间群.

按定义对一定空间群，元素$\{e|\boldsymbol{t}\}$中，$\boldsymbol{t}=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3$，即它的平移子群为分立平移群 $\bar{T}$. 而空间群中出现的全部正交变换 $\hat{\alpha}$，一定也构成一个群，它是 $O(3)$群的有限子群，记这个群为 G, G 一定是一个晶体点群. 它是空间群的一个标记，因而通常记空间群为 G^k, k 代表一定群 G 构成的空间群中的第 k 个.

容易看到分立平移子群 $\bar{T}$ 是空间群的子群，下面证明它还是不变子群.

定理 5.1.2 空间群 G^k 的平移子群 $\bar{T}_G^k$ 是空间群 G^k 的不变子群.

证明 令空间群 G^k 的元素为$\{\alpha|t\}$，而平移子群 $\bar{T}_G^k$ 的元素为$\{e|\boldsymbol{R}_n\}$，由群元素乘积的定义 5.1.7 得到

$$\begin{cases}\{\alpha|\boldsymbol{t}\}\cdot\{e|\boldsymbol{R}_n\}=\{\alpha|\alpha\boldsymbol{R}_n+\boldsymbol{t}\}\\\{e|\boldsymbol{R}_n\}\cdot\{\alpha|\boldsymbol{t}\}=\{\alpha|\boldsymbol{R}_n+\boldsymbol{t}\}\end{cases} \tag{5.1.14}$$

当$\boldsymbol{R}_n$取遍子群$\bar{T}_G^k$时，由(5.1.14)式的第一式得到子群$\bar{T}_G^k$的左陪集，由(5.1.14)式的第二式得到右陪集，用$\{\alpha|\boldsymbol{t}\}^{-1}$作用(5.1.14)式的第一式，得到

$$\begin{aligned}&\{\alpha\mid \boldsymbol{t}\}\cdot\{e\mid \boldsymbol{R}_n\}\cdot\{\alpha\mid \boldsymbol{t}\}^{-1}\\=&\{\alpha\mid \alpha\boldsymbol{R}_n+\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha^{-1}\mid -\alpha^{-1}\boldsymbol{t}\}\\=&\{e\mid \alpha\boldsymbol{R}_n\}\end{aligned}\tag{5.1.15}$$

这表明若$\boldsymbol{R}_n$是平移子群$\bar{T}_G^k$的平移向量，则$\alpha\boldsymbol{R}_n$也是$\bar{T}_G^k$群的平移向量. 也就证明了(5.1.14)式当$\boldsymbol{R}_n$取遍$\bar{T}_G^k$群时，所得到的右陪集$\{\{\alpha|\boldsymbol{R}_n+\boldsymbol{t}\}|\boldsymbol{R}_n\in\bar{T}_G^k\}$和左陪集$\{\{\alpha|\alpha\boldsymbol{R}_n+\boldsymbol{t}\}|\boldsymbol{R}_n\in\bar{T}_G^k\}$相同，因而$\bar{T}_G^k$为不变子群.

在这个定理的证明过程中，还揭示了空间群G^k的平移子群$\bar{T}_G^k$的一个重要性质，即$\bar{T}_G^k$中的平移向量$\boldsymbol{R}_n$，在空间群G^k中的正交变换α作用下，$\alpha\boldsymbol{R}_n$还是平移子群$\bar{T}_G^k$中的平移向量.

空间群G^k的平移子群T_G^k(以后把$\bar{T}_G^k$写为T_G^k)中的全部平移向量$\boldsymbol{R}_n=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3$的端点在空间$\mathbf{R}^3$中构成了一个有规则的点阵，称这个点阵为空间群$G^k$的Bravais点阵.

定义5.1.3(Bravais点阵) 由空间群G^k的平移子群T_G^k中的所有平移向量$\boldsymbol{R}_n$的端点在空间$\mathbf{R}^3$中构成的点阵称为空间群G^k的Bravais点阵，其中的点(即$\boldsymbol{R}_n$的端点)称为点阵格点(Lattice).

在定理5.1.1的证明中，已看到若$\boldsymbol{R}_n$属于空间群G^k的Bravais，则$\hat{\alpha}\boldsymbol{R}_n=\boldsymbol{x}_n'(\hat{\alpha}\in G)$，这表明Bravais点阵具有点群$G$的对称性.

空间群G^k的平移子群T_G^k所定义的Bravais点阵不仅有点群G的对称性，而且它的点群对称性更高. 下面证明关于Bravais点阵点群对称性的一个重要的定理.

定理5.1.3 一切空间群G^k的Bravais点阵都具有点群G的对称性，而且不论G中是否包括空间反演i，Bravais点阵还都具有空间反演对称性，因而空间群G^k的Bravais点阵的点对称性比点群G更大.

证明 一切空间群的Bravais点阵中的格点均可写为

$$\boldsymbol{R}_n=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3$$

(基向量$\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$因具体空间群$G^k$而定)，前面已证明它具有点群$G$的对称性，而在空间反演下

$$i\boldsymbol{R}_n=-n_1\boldsymbol{a}_1-n_2\boldsymbol{a}_2-n_3\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{R}_{n'}$$

因为格点$\boldsymbol{R}_n$中的n_1,n_2,n_3可取任意正、负整数和0，因而$\boldsymbol{R}_{n'}=-\boldsymbol{R}_n$，当然也是这个点阵中的格点，这就证明了Bravais点阵不论空间群的元素$\{\alpha|\boldsymbol{t}\}$中是否包括空间反演$\{i|\boldsymbol{t}\}$，都具有空间反演对称性.

描述空间群G^k的Bravais点阵点群对称性的点群记为G_b，由于$G_b\ni i$，而且点群G又是G_b的子群，因而$G_b\supseteq G\otimes C_i$，($C_i$为空间反演群$I$).

5.1.3 空间群元素的类型

空间群元素$\{\alpha|\boldsymbol{t}\}$可分为三种类型.

(1) 平移: 元素$\{e|\boldsymbol{t}\}$为空间的平移, 其中$\boldsymbol{t}=\boldsymbol{R}_n$, 是空间群$G^k$允许的平移向量, 在一定基矢($\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$)下由(5.1.13)式所描述, 它们的总体构成空间群G^k的平移子群$T_G^k=\{\{e|\boldsymbol{R}_n\}, \boldsymbol{R}_n=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3, n_i$为正负整数或$0\}$, 这些$\boldsymbol{R}_n$称为基本平移.

(2) 点变换: 空间群G^k中的元素$\{\alpha|\boldsymbol{0}\}\in G$, 实际上就是变换$\alpha$, 它为正交矩阵, 第二章已指出它所引起的空间变换至少保持一个点不动, 因而称为点变换, 由于

$$\{\alpha|\boldsymbol{0}\}\cdot\{\alpha'|\boldsymbol{0}\}=\{\alpha'\alpha|\boldsymbol{0}\}=\{\alpha''|\boldsymbol{0}\}$$

因而所有$\{\alpha|\boldsymbol{0}\}$的集合构成空间群$G^k$的子群, 称为点子群(由点变换构成的子群), 记点子群为$\bar{G}\subseteq G$.

注意, 一般来讲$\bar{G}\subset G$, 因为空间群G^k中可能存在元素$\{\alpha_k|\boldsymbol{t}_k\}\in G^k$, 而$\{\alpha_k|\boldsymbol{0}\}$和$\{e|\boldsymbol{t}_k\}$都不属于空间群$G^k$. 虽然$\alpha_k\in G$, 但不属于点子群$\bar{G}$, $\boldsymbol{t}_k$也不属于平移子群T_G^k. 这就引出了空间群的第三种变换$\{\alpha_k|\boldsymbol{t}_k\}$.

(3) 元素$\{\alpha_k|\boldsymbol{t}_k\}$($\alpha_k$不属于$\bar{G}$, $\boldsymbol{t}_k$不属于T_G^k). 这类元素可分为两种类型: 第一种是α_k为纯转动, 则$\{\alpha_k|\boldsymbol{t}_k\}$为绕一定轴转一定角度后再平移$\boldsymbol{t}_k$, 此时$\boldsymbol{t}_k$并不能写为(5.1.13)式的形式, 称这种变换为螺旋转动, 称螺旋转动的转动轴为螺旋轴, $\boldsymbol{t}_k$称为非基本平移. 第二种是α_k为一反射面, 称这种变换$\{\sigma|\boldsymbol{t}_k\}$为滑移反射(反射面进行反射后再平移$\boldsymbol{t}_k$, $\boldsymbol{t}_k$也不是基本平移).

由于点群G中只有四种类型的元素C_n, iC_n, σ和i. $\{C_n|\boldsymbol{t}\}$即螺旋转动, 而$\{iC_n|\boldsymbol{t}\}=\{i|\boldsymbol{t}_1\}\{C_n|\boldsymbol{t}_2\}$, $\boldsymbol{t}_1-\boldsymbol{t}_2=\boldsymbol{t}$. 因而$\{iC_n|\boldsymbol{t}\}$为$\{i|\boldsymbol{t}_1\}$与$\{C_n|\boldsymbol{t}_2\}$复合操作. $\{\sigma|\boldsymbol{t}\}$为滑移反射, 由于$i=\sigma_v\cdot C_2$, 因而$\{i|\boldsymbol{t}\}$也不是独立的, 而是螺旋转动与滑移反射的复合.

5.2 空间群的七个系列和14种Bravais点阵

5.2.1 空间群的七个系列(七个晶系)

在2.6节中已讨论了晶体学点群中只能包括$n=1, 2, 3, 4, 6$的n重转轴和n重转动反射轴, 并证明了空间群中的$\hat{\alpha}$的迹, 为

$$|T_r(\hat{\alpha})|\leqslant 3$$

下面再讨论空间群G^k中平移子群T_G^k所决定的Bravias点阵与点群G间的制约关系.

上面已指出描述Bravias点群对称性的点群G_b一定包括空间反演i, 下面的定理将进一步指出点群G_b的结构.

定理5.2.1 空间群G^k的Bravias点阵的点对称群G_b, 如果若包括$C_n(n>2)$轴, 则点群C_{nv}一定是G_b的子群, 即$C_{nv}\subset G_b$.

证明 这个定理只须证明在含有C_n轴的点群G_b中一定还存在包括C_n轴的反射面

σ_v，即点阵的基向量 $\boldsymbol{a}_i$ 在 σ_v 作用下，使 $\sigma_v\boldsymbol{a}_i = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$.

令 C_n 轴的方向为 $\boldsymbol{r}_\parallel$，$\boldsymbol{r}_\perp$ 垂直于 C_n 轴，在 $\boldsymbol{r}_\perp$ 方向上取一向量 $\boldsymbol{a}_1$，为空间群 G^k 的 Bravais 点阵在这个方向上的最小向量，用 $C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)$作用于 $\boldsymbol{a}_1$ 得到一个向量 $\boldsymbol{a}_2$，即

$$\boldsymbol{a}_2 = C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{a}_1 \tag{5.2.1}$$

由于 $\boldsymbol{a}_1$ 是 $\boldsymbol{r}_\perp$ 方向的最小向量，从几何关系上可以看出 $\boldsymbol{a}_2$ 是 $\boldsymbol{a}_2$ 方向上的群 T_G^k 中的最小平移向量，因而 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 都可作为基向量. 在 $\boldsymbol{r}_\parallel$ 与 $\boldsymbol{r}_\perp$ 所在平面上，取一个向量为第三个基矢 $\boldsymbol{a}_3$，即

$$\boldsymbol{a}_3 = \boldsymbol{r}_\parallel + \boldsymbol{r}_\perp \tag{5.2.2}$$

利用 $C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)$作用于 $\boldsymbol{a}_3$ 并减去 $\boldsymbol{a}_3$，即

$$C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{a}_3 - \boldsymbol{a}_3 = C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{r}_\perp - \boldsymbol{r}_\perp$$

$\boldsymbol{a}_3$ 是 T_G^k 中的基矢，$C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)$是 G_m 群中的元素，因而

$$C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{a}_3 - \boldsymbol{a}_3 \in T_G^k$$

由此得到

$$C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{r}_\perp - \boldsymbol{r}_\perp \in T_G^k \tag{5.2.3}$$

而且

$$\left(C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{r}_\perp - \boldsymbol{r}_\perp\right) \perp C_n \text{ 轴(即 } \boldsymbol{r}_\parallel\text{)}$$

由于基矢 $\boldsymbol{a}_1$ 在 $\boldsymbol{r}_\perp$方向，$\boldsymbol{a}_2$ 在 $C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{r}_\perp$方向，因而(5.2.3)式可写为

$$C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{r}_\perp - \boldsymbol{r}_\perp = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2, \quad n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{5.2.4}$$

以 $C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^{-1}$ 作用上式，得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_\perp - C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^{-1}\boldsymbol{r}_\perp &= n_1 C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^{-1}\boldsymbol{a}_1 + n_2 C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^{-1}\boldsymbol{a}_2 \\ &= n_1 C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^{-1}\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_1\end{aligned} \tag{5.2.5}$$

用(5.2.4)式或(5.2.5)式得到

$$\begin{aligned}&C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{r}_\perp + C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^{-1}\boldsymbol{r}_\perp - 2\boldsymbol{r}_\perp \\ &= (n_1 - n_2)\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 - n_1 C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^{-1}\boldsymbol{a}_1\end{aligned} \tag{5.2.6}$$

由几何关系可看到

$$\begin{cases} C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{r}_\perp + C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^{-1}\boldsymbol{r}_\perp = 2\cos\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{r}_\perp \\ C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^{-1}\boldsymbol{a}_1 + C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{a}_1 = 2\cos\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{a}_1 \end{cases} \tag{5.2.7}$$

把(5.2.7)式代入(5.2.6)式得到

$$\left(2\cos\frac{2\pi}{n}-2\right)\boldsymbol{r}_\perp = \left(n_1-n_2-2n_1\cos\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{a}_1+(n_1+n_2)\boldsymbol{a}_2 \tag{5.2.8}$$

在得到这些公式时利用了 $C_{r_\parallel}\left(\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{a}_2$.

下面分别对 $n=3$, 4, 6 三种情况(因为 $n>2$, 只允许这三种情况)进行讨论.

(1) 当 $n=3$ 时, $2\cos\frac{2\pi}{3}=-1$, 于是由(5.2.8)式得到

$$\boldsymbol{r}_\perp = -\frac{2n_1-n_2}{3}\boldsymbol{a}_1-\frac{n_1+n_2}{3}\boldsymbol{a}_2$$

因为 $\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{r}_\perp+\boldsymbol{r}_\parallel$, 得

$$\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{r}_\parallel-\frac{2n_1-n_2}{3}\boldsymbol{a}_1-\frac{n_1+n_2}{3}\boldsymbol{a}_2 \tag{5.2.9}$$

取一通过 $\boldsymbol{r}_\parallel$ 并垂直于 $\boldsymbol{a}_2$ 的平面为反射面 σ_v, 则在它的作用下

$$\begin{cases} \sigma_v\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{a}_1' = \boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2 \in T_G^k \\ \sigma_v\boldsymbol{a}_2 = -\boldsymbol{a}_2 \in T_G^k \\ \sigma_v\boldsymbol{a}_3 = \boldsymbol{r}_\parallel - \frac{2n_1-n_2}{3}(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2)+\frac{n_1+n_2}{3}\boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{a}_3+n_2\boldsymbol{a}_2 \in T_G^k \end{cases} \tag{5.2.10}$$

这就证明了 σ_v 是这种 Bravias 点阵的对称面, 因而包括 C_3 轴的 G_b 群, 也一定包括子群 $C_{3v}(C_{3v}=C_3\otimes\{e, \sigma_v\})$.

(2) $n=4$, 此时 $2\cos\frac{2\pi}{4}=0$, 于是由(5.2.8)式得到

$$\boldsymbol{r}_\perp = -\frac{n_1-n_2}{2}\boldsymbol{a}_1-\frac{n_1+n_2}{2}\boldsymbol{a}_2$$

因而

$$\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{r}_\parallel+\frac{n_2-n_1}{2}\boldsymbol{a}_1-\frac{n_1+n_2}{2}\boldsymbol{a}_2 \tag{5.2.11}$$

取通过 $\boldsymbol{r}_\parallel$ 和 $\boldsymbol{a}_1$ 的平面为反射面 σ_v, 于是

$$\sigma_v\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{a}_1, \qquad \sigma_v\boldsymbol{a}_2=-\boldsymbol{a}_2 \tag{5.2.12}$$

因而由(5.2.11)式得

$$\sigma_v\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{a}_3+(n_1+n_2)\boldsymbol{a}_2\in T_G^k \tag{5.2.13}$$

这也说明反射面 σ_v 保持 Bravais 点阵不变, 因而 $G_b\supset C_{4v}(C_4\otimes\{e, \sigma_v\})$.

(3) 当 $n=6$ 时, $2\cos\frac{2\pi}{6}=1$, 利用(5.2.8)式可得到

$$\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{r}_\parallel+n_2\boldsymbol{a}_1-(n_1+n_2)\boldsymbol{a}_2 \tag{5.2.14}$$

取包括 $\boldsymbol{r}_{\parallel}$ 并平分 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 间夹角的平面为反射面 σ_v，同样可证明

$$\sigma_v\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{a}_2,\quad \sigma_v\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{a}_1$$

而

$$\sigma_v\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{a}_3-(n_1+2n_2)\boldsymbol{a}_1+(n_1+2n_2)\boldsymbol{a}_2\in T_G^k \tag{5.2.15}$$

这也证明 $G_b\supset C_{6v}(C_{6v}=C_6\otimes\{e,\ \sigma_v\})$，从而证明了上述定理.

一定点群 G 构成的空间群 G^k(即空间群的元素 $\{\alpha|\boldsymbol{t}\}$，$\alpha\in G$)的 Bravais 点阵具有点群 G 的对称性，定理2.1.3 要求 Bravais 点阵具有空间反演对称性，这个定理又要求如果空间群 G^k 包括二重以上转轴，Bravais 点阵的对称群 G_b 一定包括子群 C_{nv}，这得出了空间群 G^k 的 Bravais 点阵的对称群 G_b 满足条件：

$$G_b\supset G\otimes C_i，当 G 中包括 n>2 的 C_n 轴时，G_b\supset C_{nv}$$

这两个条件唯一地限定了由点群 G 构造的空间群 G^k 的 Bravais 点阵的点对称群 G_b. 满足这些条件的点群只有七个：

$$C_i=C_1\otimes I,\quad C_{2h}=C_2\otimes C_i,\quad D_{2h}=D_2\otimes C_i,\quad D_{3d}=D_3\otimes C_i$$

$$D_{4h}=D_4\otimes C_i,\quad D_{6h}=D_6\otimes C_i,\quad O_h=O\otimes C_i$$

从而说明这七个点群决定了 Bravais 点阵只具有七种点群对称性，这七个点群中的每一个点群 $G_{mi}(i=1,2,\cdots,7)$及其所有子群所构成的 Bravais 点阵都具有点群 G_{mi} 的对称性，也就是有相同的 Bravais 点阵. Bravais 点阵按这七个可能的对称群分为七个系列，称为空间群的系列(或简称系)，用这七个空间群系列描述可能的理想晶体称为七个晶系. 空间群 G^k 的 Bravais 点具有点群 G 所属的晶系中的点群 G_b 的点对称性，同一晶系 G_b 的 Bravais 点阵具有相同结构，因而有相同的平移群 T_{G_b}. 称具有 C_i 对称性的 Bravais 点阵为三斜系；C_{2h}对称性的 Bravais 点阵为单斜系；D_{2h}为正交系；D_{3d}为三角系；D_{4h}为四角系；D_{6h}为六角系；O_h 为立方系(后面将看出这种命名的原因).

每个空间群系中包括 G_b 的若干子群 G，而一个点群 G 又可造出若干空间群，称为以点群 G 构造的空间群类. 在下表中给出了七个系中所含有的类.

空间群系(G_b)	空间群类(G)
三斜系 $C_i(=S_2)$	C_1, C_i
单斜系 C_{2h}	C_s, C_2, C_{2h}
正交系 D_{2h}	D_2, C_{2v}, D_{2h}
三角系 D_{3d}	C_3, D_3, S_6, C_{3v}, D_{3d}
四角系 D_{4h}	C_4, D_4, S_4, D_{2d}, C_{4v}, C_{4h}, D_{4h}
六角系 D_{6h}	C_6, D_6, C_{6h}, C_{6v}, C_{3h}, D_{3h}, D_{6h}
立方系 O_h	T, T_d, T_h, O, O_h

5.2.2 平移群 $T_{G_b}^k$点阵的 14 种类型

上节讨论了平移群或 Bravias 点阵对相应点群的制约，反过来如果空间群所包括的点群 G 确定之后，它们又对平移群或Bravias点阵有了一定的制约，在这种制约下 Bravias 点阵只能有 14 种类型. 每一种类型的点阵具有空间群系所属对称群 G_b 的对称性. 这种

对称性表现为一定基向量 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 之下 Bravais 点阵格点

$$\boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$$

具有点群 G_b 的对称性，即

$$g\boldsymbol{R}_n = \boldsymbol{R}_{n'} = n_1'\boldsymbol{a}_1 + n_2'\boldsymbol{a}_2 + n_3'\boldsymbol{a}_3, \quad g \in G_b \tag{5.2.16}$$

其中 n_1，n_2，n_3 和 n_1'，n_2'，n_3' 均为正负整数或零.

下面分别讨论七个空间群系的 Bravias 点阵.

（1）三斜系：三斜系的空间群 Bravias 点阵的对称群为空间反演群 $I = \{e, i\}$，或称 $S_2 = \{e, \sigma \cdot C_2\} = I$，即点阵只有空间反演对称性. 此时三个基向量为不共面的任意三个相互倾斜的向量 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$，它们之间不允许任意两个向量相垂直，如果有两个向量相互垂直，所构成的点阵格点向量

$$\boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$$

就一定存在其它对称性，这种点阵称为三斜系（三个基向量都相互倾斜）. 点阵由格点构成的最小平行六面体称为元胞，元胞为基矢 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 构成的平行六面体.

（2）单斜系：Bravais 点阵的对称群为 $C_{2h} = \{e, C_2, i, \sigma_h\}$，在 σ_h 面上取基向量 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$，它们间的夹角 $\alpha \neq 90°$，因为在 σ_h 面上，故与 C_2 轴垂直. 取第三个基向量 $\boldsymbol{a}_3$ 平行 C_2 轴，这组基向量在 C_{2h} 群作用下为

$$I\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\boldsymbol{a}_1\\ -\boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}, \quad C_{a_3}(\pi)\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\boldsymbol{a}_1\\ -\boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}, \quad \sigma_h\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}$$

因而点阵格点

$$\boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$$

具有 C_{2h} 群的对称性. 称这种点阵为简单型点阵，或简单单斜点阵. 单斜指 $\boldsymbol{a}_1$ 与 $\boldsymbol{a}_2$ 相倾斜，点阵的元胞为 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 构成的平行六面体.

如果取另一组基向量，即

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1'\\ \boldsymbol{a}_2'\\ \boldsymbol{a}_3'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{a}_1' = \boldsymbol{a}_1, \quad \boldsymbol{a}_2' = \boldsymbol{a}_2, \quad \boldsymbol{a}_3' = \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1$$

对于新的基向量

$$C_{a_3}(\pi)\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1'\\ \boldsymbol{a}_2'\\ \boldsymbol{a}_3'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\boldsymbol{a}_1\\ -\boldsymbol{a}_2\\ \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3 - \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\boldsymbol{a}_1'\\ -\boldsymbol{a}_2'\\ \boldsymbol{a}_3' - \boldsymbol{a}_1'\end{pmatrix}$$

$$\sigma_h\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1'\\ \boldsymbol{a}_2'\\ \boldsymbol{a}_3'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ -\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1'\\ \boldsymbol{a}_2'\\ -\boldsymbol{a}_3' + \boldsymbol{a}_1'\end{pmatrix}$$

因而$\{a_1', a_2', a_3'\}$为基向量的点阵也具有C_{2h}群的对称性. 这种点阵与简单型点阵相比，简单型点阵的格点

$$R_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

也是这种点阵的格点，即

$$R_{n'} = n_1' a_1' + n_2' a_2' + nn_3' a_3' = n_1' a_1 + n_2' a_2 + \frac{nn_3'}{2} a_3 + \frac{nn_3'}{2} a_1 = R_n$$

为此只须$n_1' + \frac{nn_3'}{2} = n_1$, $n_2' = n_2$, $\frac{nn_3'}{2} = n_3$. 但这两种点阵的不同之处是后一种点阵在a_1, a_3所确定的平行四边形中心处有一个格点. 称这种点阵为底心型点阵.

当取$a_3' = \frac{1}{2}a_3 + \frac{1}{2}a_2$或$a_3' = a_3 + \frac{1}{2}(a_1 + a_2)$时也可得到两种面心型点阵，这两种点阵分别为在$a_3$, a_2面心处加一格点或在a_1, a_2面心加一格点，它们可通过改变基向量编号而互相转变，因而它们是同一种底心点阵.

（3）正交系：Bravais 点群的对称群为D_{2h}的空间群系为正交系，

$$D_{2h} = \{e,\ C_2(x) = C_2^{(1)},\ C_2(y) = C_2^{(2)},\ C_2(z) = C_2^{(3)},\ i,\ \sigma_{yz} = \sigma^{(1)},\ \sigma_{xz} = \sigma^{(2)},\ \sigma_{xy} = \sigma^{(3)}\}$$

取其向量a_1, a_2, a_3分别为沿x, y, z轴的向量，这些向量在D_{2h}群作用下为

$$C_2^{(\alpha)}\begin{pmatrix} a_\alpha \\ a_\beta \\ a_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_\alpha \\ -a_\beta \\ -a_\gamma \end{pmatrix},\quad \sigma^{(\alpha)}\begin{pmatrix} a_\alpha \\ a_\beta \\ a_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_\alpha \\ a_\beta \\ a_\gamma \end{pmatrix},\quad i\begin{pmatrix} a_\alpha \\ a_\beta \\ a_\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_\alpha \\ -a_\beta \\ -a_\gamma \end{pmatrix}$$

(α, β, γ分别取 1, 2, 3)因而点阵格点

$$R_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

具有D_{2h}群对称性，称为简单型(P 型)D_{2h}群点阵.

如果选取基向量为

$$\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \frac{1}{2}a_3 + \frac{1}{2}a_1 \end{pmatrix}$$

通过与C_{2h}相同的证明可得到，由这种基矢构成的点阵也具有D_{2h}的对称性. 而且是底心型(C 型)点阵，即a_2, a_3面的中心a_3'处为点阵格点.

如果取基向量

$$\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a_2 + a_3) \\ \frac{1}{2}(a_1 + a_3) \\ \frac{1}{2}(a_1 + a_2) \end{pmatrix}$$

其逆变换为

$$a_1 = a_3' - a_1' + a_2', \quad a_2 = a_1' - a_2' + a_3', \quad a_3 = a_1' + a_2' - a_3'$$

于是在 D_{2h} 群变换下得到

$$C_2(x)\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(-a_2 - a_3) \\ \frac{1}{2}(a_1 - a_3) \\ \frac{1}{2}(a_1 - a_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_1' \\ a_3' - a_1' \\ -a_1' + a_2' \end{pmatrix}$$

$$\sigma^{(1)}\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a_2 + a_3) \\ \frac{1}{2}(-a_1 + a_3) \\ \frac{1}{2}(-a_1 + a_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_1' \\ a_1' - a_3' \\ a_1' - a_2' \end{pmatrix}$$

以及其它类似的结果，从而证明 a_1', a_2', a_3' 构成点阵的基向量，这种点阵的格点为

$$\begin{aligned} R_n &= n_1 a_1' + n_2 a_2' + n_3 a_3' \\ &= \frac{n_1}{2}(a_2 + a_3) + \frac{n_2}{2}(a_1 + a_3) + \frac{n_3}{2}(a_1 + a_2) \\ &= \frac{n_2 + n_3}{2}a_1 + \frac{n_1 + n_3}{2}a_2 + \frac{n_1 + n_2}{2}a_3 \end{aligned}$$

当取 $\frac{n_i + n_j}{2}$ 为整数时，即为简单型点阵的格点，同时在 $\frac{1}{2}(a_1 + a_2)$，$\frac{1}{2}(a_2 + a_3)$，$\frac{1}{2}(a_1 + a_3)$ 处也存在格点，因此这种点阵称为面心型点阵，记为 F 型点阵.

如果选取基向量为

$$\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3) \end{pmatrix}$$

同样可证明由 a_1', a_2', a_3' 构成的点阵仍然具有 D_{2h} 群的对称性. 这种点阵除具有 P 型点阵的格点外，还在 a_1, a_2, a_3 构成的平行六面体中心 $\frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3)$ 处存在格点，因而称体心型点阵，记为 I 型点阵.

D_{2h} 晶系有四种类型的 Bravais 点阵，即简单型（P 型），底心型（C 型），面心型（F 型）和体心型（I 型）点阵.

（4）四角系：Bravais 点群对称群为 D_{4h} 的晶系为四角形晶系，

$$D_{4h} = D_4 \otimes I = \{e, C_4, C_4^{(2)}, C_4^{(3)}, C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}, C_2^{(4)}, i, 2S_4, \sigma_h, 2\sigma_v, 2\sigma_d\}$$

取四重轴方向为基向量 a_3，在 σ_h 面上取两个相互垂直的基向量 a_1 和 a_2，而且 $\|a_1\| = \|a_2\|$，并取它们与 $C_2^{(1)}$ 和 $C_2^{(3)}$ 轴相重合. 容易看到基向量 a_1, a_2, a_3 在 D_{4h} 群作用下的

变化为

$$C_4\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_2\\-a_1\\a_3\end{pmatrix},\quad C_4^3\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-a_2\\a_1\\a_3\end{pmatrix},\quad C_4^2\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-a_1\\-a_2\\a_3\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(1)}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_1\\-a_2\\-a_3\end{pmatrix},\quad C_2^{(2)}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_2\\a_1\\-a_3\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(3)}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-a_1\\a_2\\-a_3\end{pmatrix},\quad C_2^{(4)}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-a_2\\-a_1\\-a_3\end{pmatrix}$$

其它元素均为 $i\cdot g$, $g\in D_4$，而 $ia_i=-a_i$. 因而证明了 a_1, a_2, a_3 构成 Bravais 点阵格点.

$$R_n=\sum_{i=1}^{3}n_i a_i$$

具有 D_{4h}群的对称性，这种点阵仍然称为简单型 D_{4h}点群.

取 $a_1'=a_1$, $a_2'=a_2$, $a_3'=\frac{1}{2}a_3-\frac{1}{2}(a_1+a_2)$，由前面证明可看到 a_1', a_2', a_3' 构成的 Bravais 点阵也具有 D_{4h}群的对称性. 由于 a_3' 处于 a_1, a_2, a_3 构成的平行六面体中心，因而这种点阵为体心型点阵(I 型).

四角系点阵没有底心型和面心型，因为 a_1, a_2 所决定的平行四边形的中心为 $\frac{1}{2}(a_1+a_2)$. 如果$\frac{1}{2}(a_1+a_2)$处存在格点，取这点的向量为基向量，即 $a_1'=\frac{1}{2}(a_1+a_2)$. 由于存在垂直于 a_1' 的四重轴和 a_2' 为 $C_2^{(2)}$ 和 $C_2^{(4)}$ 轴. 因而 a_1', a_2' 和 a_3' 构成的点阵也是一个简单型点阵，同样可说明侧面上也不存在面心. 因而只有简单型和体心型两种点阵.

（5）立方系：点阵的对称群为 $O_h=O\otimes I$ 群，取基向量为 a_1, a_2, a_3 分别为 O 群的三个四重轴，并且取 $\|a_1\|=\|a_2\|=\|a_3\|$.

$$C_4\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_2\\-a_1\\a_3\end{pmatrix},\quad C_2^{(1)}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_2\\a_1\\-a_3\end{pmatrix},\quad C_3^{(1)}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_3\\a_1\\a_2\end{pmatrix}$$

其它元素均为

$$g\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\pm a_i\\\pm a_j\\\pm a_k\end{pmatrix},\quad i,j,k\text{ 为 }1,2,3\text{ 的不同置换},\quad g\in O_h$$

因而由 a_1, a_2, a_3 构成的点阵具有 O_h 群的对称性. 它们构成简单型点阵(P 型).

取基矢

$$a_1'=\frac{1}{2}(a_2+a_3),\quad a_2'=\frac{1}{2}(a_1+a_3),\quad a_3'=\frac{1}{2}(a_1+a_2)$$

容易看到

$$g\begin{pmatrix}a_1'\\a_2'\\a_3'\end{pmatrix}=g\begin{pmatrix}0&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}&0&\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}&0&\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&0\end{pmatrix}g\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}&0&\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\pm a_i\\\pm a_j\\\pm a_k\end{pmatrix}$$

因为$\frac{1}{2}(a_i+a_j)=a_k'$，而

$$\begin{aligned}a_1-a_2&=2(a_2'-a_1')\\a_2-a_3&=2(a_2'-a_3')\\a_1-a_3&=2(a_3'-a_1')\\&\cdots\cdots\end{aligned}$$

因而上式仍然为

$$g\begin{pmatrix}a_1'\\a_2'\\a_3'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\pm a_i'\\\pm a_j'\\\pm a_k'\end{pmatrix}$$

这证明a_1'，a_2'，a_3'构成点阵的基矢，这种点阵格点为

$$\begin{aligned}R_n&=n_1a_1'+n_2a_2'+n_3a_3'\\&=\frac{n_1+n_3}{2}a_1+\frac{n_1+n_2}{2}a_2+\frac{n_2+n_3}{2}a_3\end{aligned}$$

因而$\frac{n_1+n_3}{2}$，$\frac{n_1+n_2}{2}$，$\frac{n_2+n_3}{2}$为整数或0时即为简单型点阵的格点. 而$\frac{1}{2}(a_1+a_2)$等为a_1，a_2，a_3构成的平行六面体的面心，因此这种点阵为面心型(F型)点阵.

取基矢

$$a_1'=a_1,\quad a_2'=a_2,\quad a_3'=\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$$

容易看到

$$g\begin{pmatrix}a_1'\\a_2'\\a_3'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}g\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\pm a_i\\\pm a_j\\\pm a_k\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\pm a_i\\\pm a_j\\\frac{1}{2}(\pm a_i\pm a_j\pm a_k)\end{pmatrix}$$

由于$\pm a_i\pm a_j\pm a_k=\pm a_3\pm\alpha a_1\pm\beta a_2$. α, β若不为0，则只能是2或-2. 因而这种基矢构成的点阵也具有O_h群对称性. 容易看出，它除了具有简单型点阵的格点外，在a_1，a_2，a_3构成的平行六面体中心也有格点，因而是体心型点阵(I型).

具有O_h群对称性的a_1，a_2，a_3构成的平行六面体，六个面是等价的，因而不能在某一对面的中心处存在格点，而其它面上没有. 这样只有面心型和体心型点阵，而没有底心型点阵.

(6) 三角系：点阵具有D_{3d}对称性，$D_{3d}=D_3\otimes I=\{e, 2C_3, 3C_2, i, 2S_3, 3\sigma_d\}$，取$C_3$

轴为基矢 $\boldsymbol{a}_3$，在 $\sigma_d^{(1)}$ 和 $\sigma_d^{(2)}$ 面上取垂直于 $\boldsymbol{a}_3$ 的两个向量为另外两个基矢 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，它们间夹角为$\frac{\pi}{3}$，而且 $\|\boldsymbol{a}_2\| = \|\boldsymbol{a}_1\|$. 容易看到

$$C_3\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_2\\ -(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2)\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix} C_2^{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_1\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(2)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\boldsymbol{a}_1\\ -\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix} C_2^{(3)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}$$

因而 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 为基矢的点阵，具有 D_{3d}的对称性，它为简单型点阵(P 型).

第二种基矢设置为三个基矢 $\|\boldsymbol{a}_1\| = \|\boldsymbol{a}_2\| = \|\boldsymbol{a}_3\|$，它们与 C_3 轴夹角都为$\frac{2\pi}{3}$，三个基矢每一个都在一个反射面 σ_d 上，因而它们间夹角都是$\frac{2\pi}{3}$. 由这种基矢构成的点阵也具有 D_{3d}的对称性，有时记这种简单型点阵为 Γ_{rh}或标记 R.

(7) 六角系：六角系的 Bravais 点阵对称群

$$D_{6h} = D_6 \otimes I = \{e,\ 2C_6,\ 2C_6^2,\ C_6^3,\ 3C_2{}',\ 3C_2{}'',\ i,\ 2S_3,\ 2S_6,\ \sigma_h,\ 3\sigma_d,\ 3\sigma_v\}$$

取 C_6 轴上的向量 $\boldsymbol{a}_3$ 为一个基向量，在 σ_h 面上取 $C_2^{(1)}$ 和 $C_2^{(2)}$ 轴为基矢量 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$，它们间夹角为$\frac{\pi}{3}$，而且 $\|\boldsymbol{a}_1\| = \|\boldsymbol{a}_2\|$，容易看到

$$C_6\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_1\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix},\quad C_6^2\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_1\\ -\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix},\quad C_6^3\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\boldsymbol{a}_1\\ -\boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(1)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix},\quad C_2^{(2)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(3)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix},\quad C_2^{(4)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}$$

$$C_2^{(5)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix},\quad C_2^{(6)}\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\boldsymbol{a}_2\\ \boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2\\ -\boldsymbol{a}_3\end{pmatrix}$$

因而由 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 构成的 Bravais 点阵具有 D_{6h}对称性，为简单型点阵.

通过上面讨论，得到了 7 个系的 14 种类型的 Bravais 点阵. 在表 5.2.1 中列出了 14 种点阵的性质. 在表 5.2.2 中给出了 14 种点阵元胞的图形. 其中六角系为了显示出六角系特点，画出了三个元胞的堆积.

表 5.2.1 14 种 Bravais 点阵

晶系	空间群类	点阵类型	基向量	基向量构成
三斜系	I,S_2	简单型(P)	任意不共面的三个矢量	
单斜系 C_{2h}	C_s, C_2, C_{2h}	简单型(P)	$a_3 \perp a_1, a_3 \perp a_2$	a_3 为 C_2 轴,a_1,a_2 在 σ_h 面上
		底心型(C)	$a_3'=(a_3+a_1)\frac{1}{2}$ $a_1'=a_1$, $a_2'=a_2$	a_3' 的端点处于 a_3 与 a_1 构成的平行四边形中心
正交系 D_{2h}	C_{2v},D_2,D_{2h}	简单型(P)	$a_1 \perp a_2 \perp a_3 \perp a_1$	a_1,a_2,a_3 分别为 C_2 轴或垂直于 C_2 轴反射面上的向量
		底心型(C)	$a_1'=a_1, a_2'=a_2$ $a_3'=(a_3+a_1)\frac{1}{2}$	a_3' 的端点处于 a_3 和 a_1 构成的平行四边形的中心
		面心型(F)	$a_1'=\frac{1}{2}(a_2+a_3)$ $a_2'=\frac{1}{2}(a_1+a_3)$ $a_3'=\frac{1}{2}(a_1+a_2)$	a_1',a_2',a_3' 的端点处于 a_1,a_2,a_3 决定的平行六面体的面心处
		体心型(I)	$a_1'=a_1, a_2'=a_2$ $a_3'=\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$	a_3' 的端点处于平行六面体的中心处
三角系 D_{3d}	S_3,S_6,C_{3v}, D_3,D_{3d}	简单型(P)	a_1,a_2, $\Vert a_1 \Vert = \Vert a_2 \Vert$ a_1 与 a_2 夹角为$\frac{2\pi}{3}$	a_3 为 C_3 轴 a_1,a_2 为二重轴 $C_2^{(1)},C_2^{(2)}$ 或在二重轴夹角的分角线上
		简单型(R)	$\Vert a_1 \Vert = \Vert a_2 \Vert = \Vert a_3 \Vert$ $a_1'=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1+a_3)$, $a_2'=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_2+a_3)$ $a_3'=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_3-\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1+a_2))$	a_1',a_2',a_3' 在三个 σ_v 面上,与 C_3 轴夹角为$\frac{\pi}{2}$,它们间夹角为$\frac{\pi}{3}$
六角系 D_{6h}	C_{3h},D_{3h},C_6, C_{6h},C_{6v},D_6,D_{6h}	简单型(P)	a_1,a_2, $\Vert a_1 \Vert = \Vert a_2 \Vert$ a_1 与 a_2 间夹角为$\frac{\pi}{3}$	a_3 为 C_6 轴,a_1,a_2 为 σ_h 面上的 $C_2^{(1)}$ 和 $C_2^{(2)}$ 轴
四角系 D_{4h}	S_4,C_4,D_{2d}, D_4,C_{4v},C_{4h},D_{4h}	简单型	a_1,a_2, $\Vert a_1 \Vert = \Vert a_2 \Vert$ $a_1 \perp a_2, a_3$	a_3 为 C_4 轴,a_1,a_2 在 σ_h 面上并且为 $C_2^{(1)}$ 和 $C_2^{(2)}$ 轴
		体心型(I)	$a_1'=a_1, a_2'=a_2$ $a_3'=\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$	a_3' 的端点处于 a_1,a_2,a_3 平行六面体中心
立方系 O_h	T_1,T_d,T_h, O,O_h	简单型(P)	a_1,a_2,a_3, $\Vert a_1 \Vert = \Vert a_2 \Vert = \Vert a_3 \Vert$ $a_1 \perp a_2 \perp a_3 \perp a_1$	a_1,a_2,a_3 分别为 x,y,z 轴
		面心型(F)	$a_1'=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_2+a_3), a_2'=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1+a_3)$ $a_3'=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1+a_2)$	a_1',a_2',a_3' 的端点处于立方体的面心
		体心型(I)	$a_1'=a_1, a_2'=a_2$ $a_3'=\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$	a_3' 的端点处于立方体的中心

表 5.2.2　14 种 Bravais 点阵的元胞图形

晶系 \ 点阵	简单型(P)	底心型(C)	体心型(I)	面心型(F)
三斜				
单斜				
正交				
三角				
四角				
六角				
立方				

5.3　空间群的确定及其符号

5.3.1　空间群的确定及其符号

1. *空间群的确定*

一定点群 G 构造的空间群 G^k 的 Bravais 点阵(具有平移子群 T_{G_b}的对称性)属于 G 所在系(G_b)中一定类型 Γ(如简单型 P, 体心型 I, 面心型 F, 底心型 C)的点阵. 由于同一个 G 可构造出一类空间群, 而具体的 G^k 是 G 类空间群中的一个, 因而空间群 G^k 有如下的关系:

$$\text{系}(G_b)\rightarrow\text{型}(\Gamma)\rightarrow\text{类}(G)\rightarrow\text{具体空间群 } G^k$$

一定的类 G 只能属于一定的系，也就是说 G 本身也标明了它的系(即 G_b). 因而以 $G(\Gamma)^k$标志空间群，G 为构造出空间群的点群(它本身唯一地属于一定的系)，Γ 标志它的点阵的类型，K 标记一定系(G_b)，一定型(Γ)一定类(G)中的第 k 个空间群，以 $T_{G_b}(\Gamma)$标记 $G(\Gamma)^k$ 的平移子群，它对一定系(G_b)和一定型的点阵(Γ)是相同的.

空间群 $G(\Gamma)^k$ 的平移子群 $T_{G_b}(\Gamma)$是它的不变子群，因而空间群$G(\Gamma)^k$的全部元素($\{\alpha|\boldsymbol{t}\}$)可写为平移子群陪集的直和，即

$$G(\Gamma)^k = \sum_{\alpha\in G} \oplus \{\alpha \mid \boldsymbol{t}\} \cdot T_{G_b}(\Gamma) \tag{5.3.1}$$

前面指出$\{\alpha|\boldsymbol{t}\}$分为两种，一种是点变换，即

$$\{\alpha|\boldsymbol{0}\} \in G(\Gamma)^k,\ \alpha\in \bar{G}$$

对这种 α 存在

$$\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\} = \{\alpha|\boldsymbol{0}\} \cdot \{e|\alpha^{-1}\boldsymbol{R}_n\} = \{\alpha|\boldsymbol{0}\} \cdot \{e|\boldsymbol{R}_n'\} \tag{5.3.2}$$

对于这种元素的陪集，代表元素为$\{\alpha|\boldsymbol{0}\}$，因为陪集

$$\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\} \cdot T_{G_b}(\Gamma) = \{\alpha|\boldsymbol{0}\} \cdot \{e|\alpha^{-1}\boldsymbol{R}_n\} \cdot T_{G_b}(\Gamma) = \{\alpha|\boldsymbol{0}\} \cdot T_{G_b}(\Gamma)$$

全部 $\alpha(\{\alpha|\boldsymbol{0}\}\in G(\Gamma)^k)$构成空间群的点子群 $\bar{G}$. 第二种元素$\{\alpha|\boldsymbol{t}\}$为螺旋轴或滑移面，对于它们$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\in G(\Gamma)^k$，但$\{\alpha_i|\boldsymbol{0}\}$，$\{e|\boldsymbol{t}_i\}$均不属于 $G(\Gamma)^k$，这类元素为

$$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i+\boldsymbol{R}_n\} = \{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\} \cdot \{e|\alpha_i^{-1}\boldsymbol{R}_n\}$$

非基本平移 $\boldsymbol{t}_i$ 是完全确定的，这种元素的陪集代表元素为$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}$. 因而

$$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i+\boldsymbol{R}_n\} \cdot T_{G_b}(\Gamma) = \{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\} \cdot T_{G_b}(\Gamma) \tag{5.3.3}$$

因此(5.3.1)式可一般地表示为

$$G(\Gamma)^k = \sum_{\alpha\in\bar{G}} \oplus \{\alpha \mid \boldsymbol{0}\} \cdot T_{G_b}(\Gamma) \oplus \sum_{\substack{\alpha_i\in G\\ \alpha_i\notin\bar{G}}} \oplus \{\alpha_i \mid \boldsymbol{t}_i\} \cdot T_{G_b}(\Gamma) \tag{5.3.4}$$

对于一定系(G_b)型(Γ)和类(G)的空间群，$T_{G_b}(\Gamma)$是完全确定的，即

$$T_{G_b}(\Gamma) = \{\{e|\boldsymbol{R}_n\},\quad \boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3\} \tag{5.3.5}$$

$\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 为 G_{m_1}系 Γ 型点阵的基向量. 因而对于一定系、型和类中的空间群 $G(T)^k$ 只须确定它的可能的非基本平移 $\boldsymbol{t}_i$，换言之，对于一定系、型、类中的所有可能的空间群，只存在一些特定的非基本平移 $\boldsymbol{t}_i$ 可以满足群的要求. (5.3.4)式第二项求和只包括螺旋轴和滑移面.

因而空间群从元素构成上看又可分为两种，一种是不包括螺旋轴和滑移面的空间群，称为简单空间群，简单空间群有 73 个;另一种是包括螺旋轴或滑移面的空间群为非简单空间群.

构造简单空间群比较容易，此时(5.3.4)式为

$$G(\Gamma)^k = \sum_{\alpha\in G} \oplus \{\alpha \mid \boldsymbol{0}\} T_{G_b}(\Gamma) \tag{5.3.6}$$

点子群 $\bar{G} = G$.

对于非简单空间群，(5.3.4)式为

$$G(\Gamma)^k = \sum_{\alpha\in\bar{G}} \oplus \{\alpha \mid \mathbf{0}\} T_{G_b}(\Gamma) \oplus \sum_{\substack{C_n\ni G\\ C_n\notin\bar{G}}} \{C_n \mid \boldsymbol{t}_n\} \cdot T_{G_b}(\Gamma) \oplus \sum_{\substack{\sigma_h\in G\\ \sigma_h\notin\bar{G}}} \{\sigma_h \mid \boldsymbol{t}_k\} \cdot T_{G_b}(\Gamma) \tag{5.3.7}$$

滑移面满足条件$\{\sigma_h|\boldsymbol{t}\}^2 = \{\sigma_h|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\sigma_h|\boldsymbol{t}\} = \{e|\sigma_h\boldsymbol{t}+\boldsymbol{t}\}\in G(\Gamma)^k$，即

$$\sigma_h\boldsymbol{t}+\boldsymbol{t}=\boldsymbol{R}_n \tag{5.3.8}$$

令$\boldsymbol{t}=\boldsymbol{t}_{\parallel}+\boldsymbol{t}_{\perp}$，$\boldsymbol{t}_{\parallel}$为$\boldsymbol{t}$在反射面$\sigma_h$上的分量，$\boldsymbol{t}_{\perp}$为$\boldsymbol{t}$垂直于反射面$\sigma_h$的分量，因而(5.3.8)式变为

$$\sigma_h\boldsymbol{t}+\boldsymbol{t}=\sigma_h(\boldsymbol{t}_{\parallel}+\boldsymbol{t}_{\perp})+\boldsymbol{t}_{\parallel}+\boldsymbol{t}_{\perp}=2\boldsymbol{t}_{\parallel}=\boldsymbol{R}_n \tag{5.3.9}$$

$\sigma_h\boldsymbol{t}_{\perp}=-\boldsymbol{t}_{\perp}$，$\sigma_h\boldsymbol{t}_{\parallel}=\boldsymbol{t}_{\parallel}$，因而

$$\boldsymbol{t}_{\parallel}=\frac{1}{2}\boldsymbol{R}_n^0 \tag{5.3.9'}$$

这表明在σ_h面上只允许平移$\frac{1}{2}\boldsymbol{R}_n^0$，$\boldsymbol{R}_n^0$为$\sigma_h$面上距原点最近的点阵格点的距离(一般取$\boldsymbol{t}=\boldsymbol{t}_{\parallel}$).

对于$\{C_n|\boldsymbol{t}\}$满足条件

$$\{C_n \mid \boldsymbol{t}\}^n=\{e \mid n\boldsymbol{t}_{\parallel}+\sum_{k=1}^{n}C_n^{k-1}\boldsymbol{t}_{\perp}\}=\{e \mid n\boldsymbol{t}_{\parallel}\}\in G(\Gamma)^k \tag{5.3.10}$$

其中$\boldsymbol{t}=\boldsymbol{t}_{\parallel}+\boldsymbol{t}_{\perp}$，$\boldsymbol{t}_{\parallel}$为沿$C_n$轴方向的平移分量，$\boldsymbol{t}_{\perp}$为垂直$C_n$轴的平移分量，容易证明$\sum_{k=1}^{n}C_n^{k-1}\boldsymbol{t}_{\perp}=\mathbf{0}$. 这要求

$$n\boldsymbol{t}_{\parallel}=\boldsymbol{R}_n^0,\quad \boldsymbol{t}_{\parallel}=\frac{1}{n}\boldsymbol{R}_n^0 \tag{5.3.10'}$$

$\boldsymbol{R}_n^0$是C_n轴距原点最近的格点距离，一般只取$\boldsymbol{t}=\boldsymbol{t}_{\parallel}$.

当空间群$G(\Gamma)^k$只有一个螺旋轴或一个滑移面时，只取非基本平移为$\boldsymbol{t}_{\parallel}$并不失于一般性，因为当存在$\boldsymbol{t}_{\perp}$时，当把坐标系作一个平移$\{e|\boldsymbol{P}\}$时，螺旋轴的变化为

$$\{e \mid \boldsymbol{P}\}^{-1}\{C_n \mid \boldsymbol{t}_{\parallel}+\boldsymbol{t}_{\perp}\}\cdot\{e \mid \boldsymbol{P}\}=\{C_n \mid \boldsymbol{t}_{\parallel}+\boldsymbol{t}_{\perp}+C_n\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}\}=\{C_n \mid \boldsymbol{t}_{\parallel}\}$$

上式为$\boldsymbol{P}-C_n\boldsymbol{P}=\boldsymbol{t}_{\perp}$时的结果，即在坐标系移动满足这个条件的$\boldsymbol{P}$后，具有$\boldsymbol{t}_{\perp}$方向的螺旋轴变为只有$\boldsymbol{t}_{\parallel}$平移的螺旋轴.

对于滑移面也是如此，因为

$$\{\sigma|\boldsymbol{t}_{\parallel}+\boldsymbol{t}_{\perp}\}=\{m|\boldsymbol{t}_{\parallel}\} \tag{5.3.11}$$

这里反射面m是原反射面σ沿$\boldsymbol{t}_{\perp}$方向平移$\frac{1}{2}\boldsymbol{t}_{\perp}$后的新的反射面.

因而一般可以不考虑$\boldsymbol{t}_{\perp}$方向的螺旋移动和$\boldsymbol{t}_{\perp}$方向的滑移，而只考虑沿螺旋轴方向的非基本平移和沿滑移面的非基本平移.

群的封闭性要求

$$\{\alpha_i \mid \boldsymbol{t}_i\}\cdot\{\alpha_j \mid \boldsymbol{t}_j\}=\{\alpha_i\cdot\alpha_j \mid \alpha_i\boldsymbol{t}_j+\boldsymbol{t}_i\}\in G(\Gamma)^k \tag{5.3.12}$$

因而要求：若$\alpha_i\cdot\alpha_j\in\bar{G}$，则

$$\alpha_i t_j + t_i = R_n \tag{5.3.13}$$

若 $\alpha_i \cdot \alpha_j = \alpha_k$ 不属于 $\bar{G}$，则

$$\alpha_i t_j + t_i = t_k + R_n^0 \tag{5.3.14}$$

R_n^0 为最小平移向量.

对于一定系、型和类的空间群 $G(\Gamma)^k$，由群的封闭性给出的全部公式(5.3.9)、(5.3.13)就得到确定非基本平移 t 的方程组，从而可解出可能的非本基平移，就得到了全部可能存在的空间群，全部空间群只有 230 个，其中 73 个简单空间群.

简单空间群中的 66 个是由 $G=\boldsymbol{G}$ 时不存在非基本平移的所有晶系可能的点阵类型造成的，在下表中给出了这些简单空间群.

简单空间群(Sch 符号)(66 个)

系	型	类
C_i	P	C_1^1, C_i^1
C_{2h}	P	C_s^1, C_2^1, C_{2h}^1
	C	C_s^2, C_2^3, C_{2h}^6
D_{2h}	P	D_2^1, C_{2v}^1, D_{2h}^1
	C	D_2^6, C_2^{11}, D_{2h}^{19}
	F	D_2^7, C_{2v}^{18}, D_{2h}^{23}
	I	D_2^8, C_{2v}^{20}, D_{2h}^{25}
D_{3d}	P	C_3^1, D_3^1, S_6^1, C_{3v}^1, D_{3d}^1
	R	C_3^4, D_3^7, S_6^2, C_{3v}^5, D_{3d}^5
D_{4h}	P	C_4^1, D_4^1, S_4^1, D_{2d}^1, C_{4v}^1, C_{4h}^1, D_{4h}^1
	I	C_4^5, D_4^9, S_4^2, D_{2d}^9, C_{4v}^9, C_{4h}^5, D_{4h}^{17}
D_{6h}	P	C_6^1, D_6^1, C_{6h}^1, C_{6v}, C_{3h}^1, D_{3h}^1, D_{6h}^1
O_h	P	T, T_d, T_h, O, O_h
	F	T, T_d, T_h, O, O_h
	I	T, T_d, T_h, O, O_h

此外的七个简单空间群是 C_{2v}^{14}, D_3^2, C_{3v}^2, D_{3d}^3, D_{2d}^5, D_{2d}^{11}, D_{3h}^3，它们之所以构成简单空间群，是由其几何结构决定的. 从群论上看这些标记晶系的群构成一个群链.

$$\begin{array}{ccccccccc} O_h & \supset & D_{4h} & \supset & D_{2h} & \supset & C_{2h} & \supset & C_i(S_2) \\ & & & & \cap & & \cap & & \\ & & & & D_{3h} & \supset & D_{3d} & & \end{array}$$

利用这些群间半直积理论也可讨论这些问题. 有兴趣的读者可参考 Miller 著“Symmetry Groups and Their Applications”.

2. 空间群的符号

空间群的符号(实际上也是空间群的命名)有两种：一种是国际符号(简称 I 符号)；另一种是 Schoenflie 符号(简称 Sch 符号). 国际符号比较清楚地标明了空间群的性质和构成，在这种符号中第一个大写字母为点阵类型 P, I, F, C, 然后用国际符号写出标记

空间群类的点群 G，最后如果空间群中包括螺旋轴或滑移面，再在点群 G 的国际符号有关部分加以对非基本平移标记. 例如 C_{2h}的空间群，记为

$$P\frac{2}{m},\quad P\frac{2_1}{m},\quad P\frac{2}{b},\quad P\frac{2_1}{b},\quad B\frac{2}{m},\quad P\frac{2}{b}$$

$\frac{2}{m}$是 C_{2h}的国际符号，P 表示简单点阵，B 表示底心，2_1 表示 C_2 是螺旋轴，$\frac{1}{b}$表示为滑移面，$\frac{2_1}{b}$表示一个螺旋轴一个滑移面. 因而国际符号明确标明了空间群的系、型、类和类中的具体群.

另一种符号是 Sch 符号，它用 Sch 符号写出空间群的类 G，然后用 k 标示 G 类空间群中的第 k 个空间群 G^k，与国际符号相比较，Sch 符号并没有标明空间群的点阵类型和内部结构(有无螺旋轴和滑移面). 下面以 C_{2h}类为例，给出两种符号的空间群，C_{2h}类包括六个空间群，它们是：

$$C_{2h}^1=P\frac{2}{m},\quad C_{2h}^2=P\frac{2_1}{m},\quad C_{2h}^3=B\frac{2}{m}$$

$$C_{2h}^4=P\frac{2}{b},\quad C_{2h}^5=P\frac{2_1}{b},\quad C_{2h}^6=P\frac{2}{b}$$

5.3.2　三斜系和单斜系空间群的确定

下面以三斜系和单斜系为例，具体说明空间群的构造.

1. 三斜系

三斜系只包括两个点群类 C_1 和 C_i.

1° C_1 类

点群 C_1 只包括一个元素 $\{e\}$，因而空间群为 $\{e|\boldsymbol{R}_n\}$，因为三斜系只有简单类型点阵，因而这个空间群用国际符号记为 $P1$. P 代表简单型点阵，1 代表 C_1 的一重轴，Sch 符号为 C_1^1，即

$$C_1^1(P1)=\{e|\boldsymbol{R}_n\}\cdot T_{C_i}(P)=T_{C_i}(P)$$

2° C_i 类

C_i 群有两个元素 $\{e,i\}$，也只有简单型点阵，即 $T_{C_i}(P)$，空间群为

$$C_i^1(P\bar{1})=T_{C_i}(P)+\{i|\boldsymbol{t}\}\cdot T_{C_i}(P)\tag{5.3.15}$$

国际符号 $\bar{1}$ 代表一重反演轴. 由于

$$\{i|\boldsymbol{t}\}^2=\{e|-\boldsymbol{t}+\boldsymbol{t}\}=\{e|\boldsymbol{0}\}\in T_{C_i}(P)\tag{5.3.16}$$

非基本平移 $\boldsymbol{t}$ 可任意取，但从变换的几何意义上只能取 $\boldsymbol{t}=\boldsymbol{0}$. 因而空间群 C_i^1 为

$$C_i^1(P\bar{1})=T_{C_i}(P)+\{i|\boldsymbol{0}\}\cdot T_{C_i}(P)$$

由 1°和 2°得到三斜系只有两个空间群 $P1(C_1^1)$和 $P\bar{1}(C_i^1)$都是简单空间群.

2. 单斜系(C_{2h}系)

单斜系有简单型(P)、底心型(C)两种类型的点阵，平移群为 $T_{C_{2h}}(P)$和 $T_{C_{2h}}(C)$，包

括三个类，即 C_2，C_s，C_{2h}.

1° C_2 类

C_2 群只有两个元素 e 和 C_2，因而 C_2 类的空间群包括简单型点阵 $C_2(P)^k$ 和底心型点阵的 $C_2(C)^k$，k 表示 C_2 类内的第 k 个群，即

$$C_2(P)^k = T_{C_{2h}}(P) \oplus \{C_2 \mid \boldsymbol{t}\} \cdot T_{C_{2h}}(P)$$

$$C_2(C)^k = T_{C_{2h}}(C) \oplus \{C_2 \mid \boldsymbol{t}\} \cdot T_{C_{2h}}(C)$$

具体 k 的数目由允许的非基本平移 $\boldsymbol{t}$ 确定，对于 P 型点阵由于

$$\{C_2 \mid \boldsymbol{t}\}^2 = \{e \mid C_2\boldsymbol{t} + \boldsymbol{t}\} \in T_{C_{2h}}(P)$$

取非基本平移 $\boldsymbol{t}$ 为沿 C_2 轴的平移，即 $\boldsymbol{t} = n\boldsymbol{a}_3$，于是上式为

$$\{e \mid C_2\boldsymbol{t} + \boldsymbol{t}\} = \{e \mid 2n\boldsymbol{a}_3\} \in T_{C_{2h}}(P)$$

$2n\boldsymbol{a}_3$ 为 C_2 轴上距原点最近的格点，因而应当为 $\boldsymbol{0}$ 或 a_3 轴上最短的基本平移向量 $\boldsymbol{a}_3$，于是得到

$$\boldsymbol{t} = \begin{cases} \boldsymbol{0} \\ \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3 = (0,\ 0,\ \frac{1}{2}) \end{cases}$$

因而得到两个 P 型空间群，即

$$C_2^1(P) = C_2^1 = P2 = T_{C_{2h}}(P) \oplus \{C_2 \mid (0,0,0)\} \cdot T_{C_{2h}}(P)$$

$$C_2^2(P) = C_2^2 = P2_1 = T_{C_{2h}}(P) \oplus \{C_2 \mid (0,0,\frac{1}{2})\} \cdot T_{C_{2h}}(P)$$

C_2^1，C_2^2 为 Sch 符号，$P2$ 和 $P2_1$ 为国际符号，其中 P 表示简单型，2 代表二重轴，2_1 代表二重螺旋轴，$(0,\ 0,\ \frac{1}{2})$ 为非基本平移 $\boldsymbol{t}$ 在基向量 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 中的坐标.

对底心点阵前已给出基矢为 $\boldsymbol{a}_1' = \boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2' = \boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3' = \frac{1}{2}(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_3)$，取非基本平移 $\boldsymbol{t}$ 为

$$\boldsymbol{t} = n_1\boldsymbol{a}_1' + n_3\boldsymbol{a}_3', \quad C_2\boldsymbol{t} = -n_1\boldsymbol{a}_1' - \frac{1}{2}n_3\boldsymbol{a}_1 + \frac{1}{2}n_3\boldsymbol{a}_3$$

因而

$$\{C_2 \mid \boldsymbol{t}\}^2 = \{e \mid n_3\boldsymbol{a}_3\} = \{e \mid 2n_3\boldsymbol{a}_3' - n_3\boldsymbol{a}_1'\} \in \cdot T_{C_{2h}}(C)$$

由此得到

$$\boldsymbol{t} = \begin{cases} \boldsymbol{0} \\ \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1' = (\frac{1}{2},\ 0,\ 0) \end{cases}$$

上式中 $2n_3\boldsymbol{a}_3' - n_3\boldsymbol{a}_1'$ 为最短的平移距离时，须取 $n_3 = 0$ 或 $\frac{1}{2}$，当 $n_3 = \frac{1}{2}$ 时，为 $\boldsymbol{a}_3' - \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1'$ 去掉其中整数部分 $\boldsymbol{a}_3'$，为 $-\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1'$，亦即 $\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1'$. 因而得到两个空间群 $\{C_2 \mid (0,\ 0,\ 0)\}$ 和 $\{C_2 \mid (\frac{1}{2},\ 0,\ 0)\}$，但是 $\{C_2 \mid (\frac{1}{2},\ 0,\ 0)\}$ 所得到的空间群

$$T_{C_{2h}}(C) \oplus \{C_2 \mid (\frac{1}{2},\ 0,\ 0)\} \cdot T_{C_{2h}}(C)$$

与$\{C_2|\mathbf{0}\}$是同构的. 因为对空间坐标进行一个平移$\{e|\frac{1}{4}\mathbf{a}_1'\}$，即

$$\{e|\frac{1}{4}\mathbf{a}_1'\}^{-1}\cdot\{C_2|\frac{1}{2}\mathbf{a}_1'\}\cdot\{e|\frac{1}{4}\mathbf{a}_1'\}=\{C_2|\mathbf{0}\}$$

从而说明底心型点阵只有一个空间群

$$C_2^3=C_2=B2=T_{C_{2h}}(C)\oplus\{C_2|\mathbf{0}\}\cdot T_{C_{2h}}(C) \tag{5.3.17}$$

按国际符号命名规则这个空间应记为C型，但传统上对C_{2h}系(单斜系)的底心型空间群用B代替C，记为$B2$.

2° C_s类

C_s群元素为$\{e,\sigma_h\}$，因而空间群为

$$C_S^k(\Gamma)=T_{C_{2h}}(\Gamma)\oplus\{\sigma_h|\mathbf{t}\}\cdot T_{C_{2h}}(\Gamma),\quad \Gamma=P\text{ 或 }C$$

非基本平移$\mathbf{t}$取在σ_h面上，即$\mathbf{t}=n\mathbf{a}_1+m\mathbf{a}_2$，由$\{\sigma_h|\mathbf{t}\}^2=\{e|2\mathbf{t}\}\in T_{C_{2h}}(\Gamma)$，$2\mathbf{t}$为距原点最小的基本平移的要求，可得到三种解：

$$\mathbf{t}=\begin{cases}\mathbf{0}\\ \frac{1}{2}\mathbf{a}_1\text{ 或 }\frac{1}{2}\mathbf{a}_2\end{cases}$$

$\mathbf{t}=\frac{1}{2}\mathbf{a}_1$或$\mathbf{t}=\frac{1}{2}\mathbf{a}_2$给出的是同一种空间群，它们间的不同只是把基向量$\mathbf{a}_1$和$\mathbf{a}_2$互换一下. 因之得到四个空间群.

$$\begin{aligned}C_s^1&=Pm=T_{C_{2h}}(P)\oplus\{\sigma_h|(0,0,0\}\cdot T_{C_{2h}}(P)\\ C_s^2&=Pb=T_{C_{2h}}(P)\oplus\{\sigma_h|(\frac{1}{2},0,0)\}\cdot T_{C_{2h}}(P)\\ C_s^3&=Bm=T_{C_{2h}}(C)\oplus\{\sigma_h|(0,0,0)\}\cdot T_{C_{2h}}(C)\\ C_s^4&=Pb=T_{C_{2h}}(C)\oplus\{\sigma_h|(\frac{1}{2},0,0)\}\cdot T_{C_{2h}}(C)\end{aligned} \tag{5.3.18}$$

国际符号中以B表示底心型点阵，m表示反射面σ_h，b代表滑移面.

3° C_{2h}类

群$C_{2h}=C_2\otimes C_i=\{e,C_2,i,\sigma_h\}$，群$C_2$和$C_s$都是$C_{2h}$的子群，因而前面得到的$C_2$类和$C_s$类空间群也是空间群$C_{2h}^k$的子群. 这种空间群为

$$\begin{aligned}C_{2h}(\Gamma)^k&=T_{C_{2h}}(\Gamma)\oplus\{C_2|\mathbf{t}_1\}\cdot T_{C_{2h}}(\Gamma)\\ &\quad+\{\sigma_h|\mathbf{t}_2\}\cdot T_{C_{2h}}(\Gamma)\oplus\{i|\mathbf{t}_3\}\cdot T_{C_{2h}}(\Gamma),\quad \Gamma=P,C\end{aligned}$$

非基本平移$\mathbf{t}_1$，$\mathbf{t}_2$，$\mathbf{t}_3$满足条件

$$\{i|\mathbf{t}_3\}^2=\{e|\mathbf{0}\}$$

$$\{\sigma_h|\mathbf{t}_2\}\cdot\{C_2|\mathbf{t}_1\}=\{i|\sigma_h\mathbf{t}_1+\mathbf{t}_2\}=\{i|-\mathbf{t}_1+\mathbf{t}_2\}$$

因此对P型点阵：

当$\mathbf{t}_1=\mathbf{t}_2=\mathbf{0}$时，$\mathbf{t}_3=\mathbf{0}$；

当$\mathbf{t}_1=\mathbf{0}$，$\mathbf{t}_2=\frac{1}{2}\mathbf{a}_1$时，$\mathbf{t}_3=\mathbf{t}_2=\frac{1}{2}\mathbf{a}_1$；

当 $t_1=\frac{1}{2}a_3$，$t_2=\frac{1}{2}a_1$ 时，$t_3=\left(\frac{1}{2}a_1-\frac{1}{2}a_3\right)\cong\frac{1}{2}a_1+\frac{1}{2}a_3$.

对 C 型点阵：

当 $t_1=0$，$t_2=0$ 时，$t_3=0$；

当 $t_1=0$，$t_2=\frac{1}{2}a_1$ 时，$t_3=\frac{1}{2}a_1$.

因而得到 6 个空间群，即

$$\begin{cases} C_{2h}^1 = P\frac{2}{m} = T_{C_{2h}}(P)\oplus\{C_2\mid \mathbf{0}\}\cdot T_{C_{2h}}(P) \\ \qquad\oplus\{\sigma_h\mid \mathbf{0}\}\cdot T_{C_{2h}}(P)\oplus\{i\mid \mathbf{0}\}\cdot T_{C_{2h}}(P) \\ C_{2h}^2 = P\frac{2_1}{m} = T_{C_{2h}}(P)\oplus\{C_2\mid (0,0,\frac{1}{2})\}\cdot T_{C_{2h}}(P) \\ \qquad\oplus\{\sigma_h\mid \mathbf{0}\}\cdot T_{C_{2h}}(P)\oplus\{i\mid (0,0,\frac{1}{2})\}\cdot T_{C_{2h}}(P) \\ C_{2h}^4 = P\frac{2}{b} = T_{C_{2h}}(P)\oplus\{C_2\mid \mathbf{0}\}\cdot T_{C_{2h}}(P) \\ \qquad\oplus\{\sigma_h\mid (\frac{1}{2},0,0)\}\cdot T_{C_{2h}}(P)\oplus\{i\mid (\frac{1}{2},0,0)\}\cdot T_{C_{2h}}(P) \\ C_{2h}^5 = P\frac{2_1}{b} = T_{C_{2h}}(P)\oplus\{C_2\mid (0,0,\frac{1}{2})\}\cdot T_{C_{2h}}(P) \\ \qquad\oplus\{\sigma_h\mid (\frac{1}{2},0,0)\}\cdot T_{C_{2h}}(P)\oplus\{i\mid (\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})\}\cdot T_{C_{2h}}(P) \\ C_{2h}^3 = B\frac{2}{m} = T_{C_{2h}}(C)\oplus\{C_2\mid \mathbf{0}\}\cdot T_{C_{2h}}(C) \\ \qquad\oplus\{\sigma_h\mid \mathbf{0}\}\cdot T_{C_{2h}}(C)\oplus\{i\mid \mathbf{0}\}\cdot T_{C_{2h}}(C) \\ C_{2h}^6 = B\frac{2}{b} = T_{C_{2h}}(C)\oplus\{C_2\mid \mathbf{0}\}\cdot T_{C_{2h}}(C) \\ \qquad\oplus\{\sigma_h\mid (\frac{1}{2},0,0)\}\cdot T_{C_{2h}}(C)\oplus\{i\mid (\frac{1}{2},0,0)\}\cdot T_{C_{2h}}(C) \end{cases} \tag{5.3.19}$$

其中国际符号$\frac{2}{m}$表示二重反演轴，$\frac{1}{b}$代表反射滑移面，$\frac{2_1}{m}$代表螺旋反演轴.

到此得到了单斜系三类的 15 个空间群. 寻找某一类某一型的空间群，实际归纳为：由(5.3.8)，(5.3.10)，(5.3.12)，(5.3.13)，(5.3.14)等公式按群元素的封闭性找出非基本平移之间的关系，建立起非基本平移所满足的方程，求解出全部非基本平移. 其中自然包括非基本平移为 0 的简单空间群.

全部空间群为 230 个，下面在表 5.3.1 中给出了这些空间群，列出了它们的系、类、型，国际符号和 Sch 符号，打星号的是简单空间群.

表 5.10.1　230 个空间群

系	类	型	空间群
三斜系 (C_i)	C_1	P	$C_1^1(P1)$ *
	C_i	P	$C_i^1(PI)$ *
单斜系 C_{2h}	C_2	P	$S_2^1(P2)$ *
			$S_2^2(P2_1)$
		C	$S_2^3(B2)$ *
	C_s	P	$S_8^1(Pm)$ *
			$S_8^2(Pb)$
		C	$S_8^3(Bm)$ *
			$S_8^4(Bb)$
	C_{2h}	P	$C_{2h}^1(P2/m)$ *
			$C_{2h}^2(P2_1/m)$
		C	$C_{2h}^3(B2/m)$ *
			$C_{2h}^4(P2/b)$
		P	$C_{2h}^5(P2_1/b)$
		C	$C_{2h}^6(B2/b)$
正交系 D_{2h}	D_2	P	$D_2^1(P222)$ *
			$D_2^2(P222_1)$
			$D_2^3(P2_12_12)$
			$D_2^4(P2_12_12_1)$
		C	$D_2^5(C222_1)$
			$D_2^6(C222)$ *
		F	$D_2^7(F222)$ *
		I	$D_2^8(I222)$ *
			$D_2^9(I2_12_12_1)$
	C_{2v}	P	$C_{2v}^1(Pmm2)$ *
			$C_{2v}^2(Pmc2_1)$
			$C_{2v}^3(Pcc2)$
			$C_{2v}^4(Pma2_1)$
			$C_{2v}^5(Pca2_1)$
			$C_{2v}^6(Pnc2_1)$
			$C_{2v}^7(Pmn2_1)$
			$C_{2v}^8(Pba2_1)$
			$C_{2v}^9(Pna2_1)$
			$C_{2v}^{10}(Pnn2_1)$
		C	$C_{2v}^{11}(Cmm2)$ *
			$C_{2v}^{12}(Cmc2_1)$
			$C_{2v}^{13}(Ccc2)$
			$C_{2v}^{14}(Amm2)$ *
			$C_{2v}^{15}(Abm2)$
			$C_{2v}^{16}(Ama2)$
			$C_{2v}^{17}(Aba2)$
		F	$C_{2v}^{18}(Fmm2)$ *
			$C_{2v}^{19}(Fdd2_1)$
		I	$C_{2v}^{20}(Imm2)$ *
			$C_{2v}^{21}(Iba2)$
			$C_{2v}^{22}(Ima2_1)$

系	类	型	空间群
正交系 D_{2h}	D_{2h}	P	$D_{2h}^1(Pmmm)$ *
			$D_{2h}^2(Pnnn)$
			$D_{2h}^3(Pccm)$
			$D_{2h}^4(Pban)$
			$D_{2h}^5(Pmma)$
			$D_{2h}^6(Pnna)$
			$D_{2h}^7(Pmna)$
			$D_{2h}^8(Pcca)$
			$D_{2h}^9(Pbam)$
			$D_{2h}^{10}(Pccn)$
			$D_{2h}^{11}(Pbcm)$
			$D_{2h}^{12}(Pnnm)$
			$D_{2h}^{13}(Pmmn)$
			$D_{2h}^{14}(Pbcn)$
			$D_{2h}^{15}(Pbca)$
			$D_{2h}^{16}(Pnma)$
		C	$D_{2h}^{17}(Cmcm)$
			$D_{2h}^{18}(Cmca)$
			$D_{2h}^{19}(Cmmm)$ *
			$D_{2h}^{20}(Cccm)$
			$D_{2h}^{21}(Cmma)$
			$D_{2h}^{22}(Ccca)$
		F	$D_{2h}^{23}(Fmmm)$ *
			$D_{2h}^{24}(Fddd)$
		I	$D_{2h}^{25}(Immm)$ *
			$D_{2h}^{26}(Ibam)$
			$D_{2h}^{27}(Ibca)$
			$D_{2h}^{28}(Imma)$
四角系 D_{4h}	C_4	P	$C_4^1(P4)$ *
			$C_4^2(P4_1)$
			$C_4^3(P4_2)$
			$C_4^4(P4_3)$
		I	$C_4^5(I4)$ *
			$C_4^6(I4_1)$
	S_4	P	$S_4^1(P4)$ *
		I	$S_4^2(I4)$ *
	C_{4h}	P	$C_{4h}^1(P4/m)$ *
			$C_{4h}^2(P4_2/m)$
			$C_{4h}^3(P4/n)$
			$C_{4h}^4(P4_2/n)$
		I	$C_{4h}^5(I4/m)$ *
			$C_{4h}^6(I4_1/a)$
	D_4	P	$D_4^1(P422)$ *
			$D_4^2(P42_12)$
			$D_4^3(P4_122)$
			$D_4^4(P4_12_12)$

系	类	型	空间群
四角系 D_{4h}	D_4	P	$D_4^5(P4_222)$
			$D_4^6(P4_22_12)$
			$D_4^7(P4_322)$
			$D_4^8(P4_32_12)$
		I	$D_4^9(I422)$ *
			$D_4^{10}(I4_122)$
	C_{4v}	P	$C_{4v}^1(P4mm)$ *
			$C_{4v}^2(P4bm)$
			$C_{4v}^3(P4_2cm)$
			$C_{4v}^4(P4_2nm)$
		I	$C_{4v}^5(P4cc)$
			$C_{4v}^6(P4nc)$
			$C_{4v}^7(P4_2nc)$
			$C_{4v}^8(P4_2bc)$
			$C_{4v}^9(I4mm)$ *
			$C_{4v}^{10}(I4cm)$
			$C_{4v}^{11}(I4_1md)$
			$C_{4v}^{12}(I4_1cd)$
	D_{2d}	P	$D_{2d}^1(P\bar{4}2m)$ *
			$D_{2d}^2(P\bar{4}2c)$
			$D_{2d}^3(P\bar{4}2_1m)$
			$D_{2d}^4(P\bar{4}2_1c)$
			$D_{2d}^5(P\bar{4}m2)$
			$D_{2d}^6(P\bar{4}c2)$
			$D_{2d}^7(P\bar{4}b2)$
			$D_{2d}^8(P\bar{4}n2)$
		I	$D_{2d}^9(I\bar{4}m2)$ *
			$D_{2d}^{10}(I\bar{4}c2)$
			$D_{2d}^{11}(I\bar{4}2m)$ *
			$D_{2d}^{12}(I\bar{4}2d)$
	D_{4h}	P	$D_{4h}^1(P4/mmm)$ *
			$D_{4h}^2(P4/mcc)$
			$D_{4h}^3(P4/nbm)$
			$D_{4h}^4(P4/nnc)$
			$D_{4h}^5(P4/mbm)$
			$D_{4h}^6(P4/mnc)$
			$D_{4h}^7(P4/nmm)$
			$D_{4h}^8(P4/ncc)$
			$D_{4h}^9(P4_2/mmc)$
			$D_{4h}^{10}(P4_2/mcm)$
			$D_{4h}^{11}(P4_2/nbc)$
			$D_{4h}^{12}(P4_2/nnm)$
			$D_{4h}^{13}(P4_2/mbc)$
			$D_{4h}^{14}(P4_2/mnm)$
			$D_{4h}^{15}(P4_2/nmc)$
			$D_{4h}^{16}(P4_2/ncm)$

续表 5. 10. 1

系	类	型	空间群
四角系 D_{4h}	C_{4v}	I	$D_{4h}^{17}(I4/mmm)$ *
			$D_{4h}^{18}(I4/mcm)$
			$D_{4h}^{19}(I4_1/amd)$
			$D_{4h}^{20}(I4_1/acd)$
三角系 D_{3d}	C_3	P	$C_3^1(P3)$ *
			$C_3^2(P3_1)$
			$C_3^3(P3_2)$
			$C_3^4(R3)$ *
	C_{3i}	P	$C_{3i}^1(P\bar{3})$ *
			$C_{3i}^2(R\bar{3})$ *
	D_3	P	$D_3^1(P312)$ *
			$D_3^2(P321)$ *
			$D_3^3(P3_112)$
			$D_3^4(P3_121)$
			$D_3^5(P3_212)$
			$D_3^6(P3_221)$
			$D_3^7(R32)$ *
	C_{3v}	P	$C_{3v}^1(P31m)$ *
			$C_{3v}^2(P31m)$ *
			$C_{3v}^3(P3c1)$
			$C_{3v}^4(P31c)$
			$C_{3v}^5(R3m)$ *
			$C_{3v}^6(R3c)$
	D_{3d}	P	$D_{3d}^1(P\bar{3}1m)$ *
			$D_{3d}^2(P\bar{3}1c)$
			$D_{3d}^3(P\bar{3}m1)$ *
			$D_{3d}^4(P\bar{3}c1)$
			$D_{3d}^5(R\bar{3}m)$ *
			$D_{3d}^6(R\bar{3}c)$

系	类	型	空间群
六角系 D_{6h}	C_6	P	$C_6^1(P6)$ *
			$C_6^2(P6_1)$
			$C_6^3(P6_5)$
			$C_6^4(P6_2)$
			$C_6^5(P6_4)$
			$C_6^6(P6_3)$
	C_{3h}	P	$C_{3h}^1(P\bar{6})$ *
	C_{6h}	P	$C_{6h}^1(P6/m)$ *
			$C_{6h}^2(P6_3/m)$
	D_6	P	$D_6^1(P622)$ *
			$D_6^2(P6_122)$
			$D_6^3(P6_522)$
			$D_6^4(P6_222)$
			$D_6^5(P6_422)$
			$D_6^6(P6_322)$
	C_{6v}	P	$C_{6v}^1(P6mm)$ *
			$C_{6v}^2(P6cc)$
			$C_{6v}^3(P6_3cm)$
			$C_{6v}^4(P6_3mc)$
	D_{3h}	P	$D_{3h}^1(P\bar{6}m2)$ *
			$D_{3h}^2(P\bar{6}c2)$ *
			$D_{3h}^3(P\bar{6}2m)$
			$D_{3h}^4(P\bar{6}2c)$
	D_{6h}	P	$D_{6h}^1(P6/mmm)$ *
			$D_{6h}^2(P6/mcc)$
			$D_{6h}^3(P6_3/mcm)$
			$D_{6h}^4(P6_3/mmc)$
立方系 O_h	T	P	$T^1(P23)$ *
		F	$T^2(F23)$ *
		I	$T^3(I23)$ *
			$T^4(P2_13)$
			$T^5(I2_13)$

系	类	型	空间群
立方系 O_h	T_h	P	$T_h^1(Pm3)$ *
			$T_h^2(Pn3)$
		F	$T_h^3(Fm3)$ *
			$T_h^4(Fd3)$
			$T_h^5(Im3)$ *
			$T_h^6(Pa3)$
		I	$T_h^7(Ia3)$
	O	P	$O^1(P432)$ *
			$O^2(P4_232)$
		F	$O^3(F432)$ *
			$O^4(F4_132)$
			$O^5(I432)$ *
			$O^6(P4_332)$
			$O^7(P4_132)$
		I	$O^8(I4_132)$
	T_d	P	$T_d^1(P\bar{4}3m)$ *
		F	$T_d^2(F\bar{4}3m)$ *
			$T_d^3(I\bar{4}3m)$ *
			$T_d^4(P\bar{4}3n)$
			$T_d^5(F\bar{4}3c)$
		I	$T_d^6(I\bar{4}3d)$
	O_h	P	$O_h^1(Pm3m)$ *
			$O_h^2(Pn3n)$
			$O_h^3(Pm3n)$
			$O_h^4(Pn3m)$
		F	$O_h^5(Fm3m)$ *
			$O_h^6(Fm3c)$
			$O_h^7(Fd3m)$
			$O_h^8(Fd3c)$
		I	$O_h^9(Im3m)$ *
			$O_h^{10}(Ia3d)$

5.4　正交系空间群

正交系空间群包括三个类，即 C_{2v}，D_2 和 D_{2h}类，有简单型(P 型)，底心型(C 或 A 型)，面心型(F 型)和体心型(I 型)四种类型的点阵，简单型(P 型)点阵的基矢为

$$\boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_3 \perp \boldsymbol{a}_1, \quad \|\boldsymbol{a}_1\| = \|\boldsymbol{a}_2\| \tag{5.4.1}$$

使它们分别平行 x，y，z 轴. 底心型(C 型)点阵的基矢为

$$\boldsymbol{a}_1' = \boldsymbol{a}_1, \quad \boldsymbol{a}_2' = \boldsymbol{a}_2, \quad \boldsymbol{a}_3' = \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1 \tag{5.4.2}$$

底心在 $\boldsymbol{a}_3$，$\boldsymbol{a}_1$ 面上. 底心型点阵(A 型)点阵的基矢为

$$\boldsymbol{a}_1' = \boldsymbol{a}_1, \quad \boldsymbol{a}_2' = \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1, \quad \boldsymbol{a}_3' = \boldsymbol{a}_3 \tag{5.4.3}$$

底心在 a_1, a_2 面上. 面心型(F 型)点阵的基矢为

$$a_1' = \frac{1}{2}a_1 + \frac{1}{2}a_2, \quad a_2' = \frac{1}{2}a_3 + \frac{1}{2}a_2, \quad a_3' = \frac{1}{2}a_3 + \frac{1}{2}a_1 \tag{5.4.4}$$

体心型(I 型)点阵的基矢为

$$a_1' = a_1, \quad a_2' = a_2, \quad a_3' = \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3) \tag{5.4.5}$$

5.4.1 正交系 C_{2v} 类空间群

C_{2v} 群元素在 x, y, z 坐标系中为

$$C_{2z} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_{xz} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_{yz} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

1. C_{2v} 类简单型空间群 $C_{2v}(P)^k$

把空间群 $C_{2v}(P)^k$ 按平移群 $T_{D_{2h}}(P)$ 的陪集分解，即

$$\begin{aligned} C_{2v}(P)^k &= T_{D_{2h}}(P) \oplus \{C_{2z} \mid t_1\} \cdot T_{D_{2h}}(P) \\ &\oplus \{\sigma_{xz} \mid t_2\} \cdot T_{D_{2h}}(P) \oplus \{\sigma_{yz} \mid t_3\} T_{D_{2h}}(P) \end{aligned} \tag{5.4.6}$$

滑移面 σ_{xz} 和 σ_{yz} 的非基本平移在这两个面上，因而三个非基本平移为

$$\begin{cases} t_1 = n_1 a_1 + m_1 a_2 + l_1 a_3 \\ t_2 = n_2 a_1 + l_2 a_3 \\ t_3 = m_3 a_2 + l_3 a_3 \end{cases} \tag{5.4.7}$$

由关系式

$$\begin{cases} \{C_{2z} \mid t_1\}^2 = \{e \mid C_{2z} t_1 + t_1\} = \{e \mid 2l_1 a_3\} \in T_{D_{2h}}(P) \\ \{\sigma_{xz} \mid t_2\}^2 = \{e \mid 2n_2 a_1 + 2l_2 a_3\} \in T_{D_{2h}}(P) \\ \{\sigma_{yz} \mid t_3\}^2 = \{e \mid 2m_3 a_2 + 2l_3 a_3\} \in T_{D_{2h}}(P) \\ \{C_{2z} \mid t_1\} \cdot \{\sigma_{xz} \mid t_2\} \cdot \{\sigma_{yz} \mid t_3\} \\ \qquad = \{e \mid (n_1 - n_2) a_1 + (m_1 + m_3) a_2 + (l_1 + l_2 + l_3) a_3\} \end{cases} \tag{5.4.8}$$

中的第 1、第 2、第 3 式得到

$$l_1 = \begin{cases} 0, \\ \frac{1}{2}, \end{cases} \quad n_2 = \begin{cases} 0, \\ \frac{1}{2}, \end{cases} \quad l_2 = \begin{cases} 0, \\ \frac{1}{2}, \end{cases} \quad m_3 = \begin{cases} 0, \\ \frac{1}{2}, \end{cases} \quad l_3 = \begin{cases} 0 \\ \frac{1}{2} \end{cases} \tag{5.4.9}$$

由第 4 式得到

$$l_1 + l_2 + l_3 = \begin{cases} 0, \\ 1, \end{cases} \quad m_1 + m_3 = \begin{cases} 0, \\ 1, \end{cases} \quad n_1 - n_2 = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} \tag{5.4.10}$$

联立(5.4.9)和(5.4.10)式得到 10 种允许的非基本平移:

$$t_1 = t_2 = t_3 = (0, 0, 0)$$

$$t_1 = (0, 0, \frac{1}{2}), \quad t_2 = (0, 0, \frac{1}{2}), \quad t_3 = (0, 0, 0)$$

$$t_1 = (0, 0, 0), \quad t_2 = (0, 0, \frac{1}{2}), \quad t_3 = (0, 0, \frac{1}{2})$$

$$t_1 = (\frac{1}{2}, 0, 0), \quad t_2 = (\frac{1}{2}, 0, 0), \quad t_3 = (0, 0, 0)$$

$$t_1 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), \quad t_2 = (\frac{1}{2}, 0, 0), \quad t_3 = (0, 0, \frac{1}{2})$$

$$t_1 = (\frac{1}{2}, 0, 0), \quad t_2 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), \quad t_3 = (0, 0, \frac{1}{2})$$

$$t_1 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), \quad t_2 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), \quad t_3 = (0, 0, 0)$$

$$t_1 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0), \quad t_2 = (\frac{1}{2}, 0, 0), \quad t_3 = (0, \frac{1}{2}, 0)$$

$$t_1 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), \quad t_2 = (\frac{1}{2}, 0, 0), \quad t_3 = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$$

$$t_1 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0), \quad t_2 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), \quad t_3 = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$$

由(5.4.8)式还可得到6种允许解，如

$$t_1 = (0, 0, \frac{1}{2}), t_2 = (0, 0, 0), t_3 = (0, 0, \frac{1}{2}), \cdots$$

但是这些解与 $t_1 = (0, 0, \frac{1}{2})$, $t_2 = (0, 0, \frac{1}{2})$, $t_3 = (0, 0, 0)$ 是同构的，因为前一种解与后一种解的差别仅在于把反射面 σ_{xz} 和 σ_{yz} 交换一下，并没有实质上的不同. 这6种解实际上不是独立的解，它们已包括在上述10种解中了. 在上面对 t_1, t_2, t_3 的表达式采取了以 a_1, a_2, a_3 为基向量的坐标表示，因而得到10种P型点阵的空间群 C_{2v}^k, $k = 1, 2, \cdots, 10$.

2. *底心型空间群 $C_{2v}(C)^k$*

底心型可分为两种，一种是底心在 a_3, a_1 面上，这种底心型记为 $C_{2v}(A)^k$，则

$$C_{2v}(A)^k = T_{C_{2v}}(A) \oplus \{C_{2z} \mid t_1\} \cdot T_{D_{2h}}(A) + \{\sigma_{xz} \mid t_2\} \cdot T_{D_{2h}}(A) + \{\sigma_{yz} \mid t_3\} \cdot T_{D_{2h}}(A)$$

在这种情况下的非基本平移在 a_1', a_2', a_3' 基向量中取为：

$$\begin{cases} t_1 = n_1 a_1' + m_1 a_2' + l_1 a_3' = (n_1 + \frac{1}{2} l_1) a_1 + m_1 a_2 + l_1 a_3 \\ t_2 = n_2 a_1' + l_2 a_3' = n_2 a_1 + \frac{1}{2} l_2 a_1 + l_2 a_3 \\ t_3 = m_2 a_2' + l_3 a_3' = m_2 a_2 + \frac{1}{2} l_3 a_1 + l_3 a_3 \end{cases} \tag{5.4.11}$$

把(5.4.11)式定义的非基本平移代入(5.4.8)式，并联立求解可得到四种允许的非基本平移向量：

$$t_1 = t_2 = t_3 = (0, 0, 0)$$

$$t_1 = (0, 0, 0), \quad t_2 = (0, \frac{1}{2}, 0), \quad t_3 = (0, \frac{1}{2}, 0)$$

$$t_1=(0,0,0),\quad t_2=(0,0,\frac{1}{2}),\quad t_3=(0,0,\frac{1}{2})$$

$$t_1=(0,0,0),\quad t_2=(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}),\quad t_3=(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$$

这里仍然以 a_1, a_2, a_3 为基向量，利用这个基矢中的坐标表示非基本平移. 例如：

$$\{C_{2z}|t_1\}^2=\{e|\frac{1}{2}l_3a_1+l_3a_3\}\in T_{D_{2h}}(A)$$

导出 $l_3=0$，它们为底心型点阵对应的 4 种空间群 C_{2v}^k, $k=14, 15, 16, 17$.

3. 另一种底心型(C)空间群

对于 a_1, a_2 面上的底心型空间群可由基向量 $a_1'=a_1$, $a_2'=\frac{1}{2}a_1+\frac{1}{2}a_2$, $a_3'=a_3$，利用相应的(5.4.8)式得到三种解，即

$$t_1=t_2=t_3=(0,0,0)$$

$$t_1=(0,0,\frac{1}{2}),\ t_2=(0,0,0),\ t_3=(0,0,\frac{1}{2})$$

$$t_1=(0,0,0),\ t_2=(0,0,\frac{1}{2}),\ t_3=(0,0,\frac{1}{2})$$

它们为空间群 C_{2v}^i, $i=11, 12, 13$.

4. 面心型和体心型空间群 $C_{2v}(F)^k$ 和 $C_{2v}(\mathrm{I})^k$

对于面心型和体心型空间群，由它们的基向量利用相应的(5.3.3)式，可决定非基本平移向量，结果对面心型得到两种非基本平移，即

$$t_1=t_2=t_3=(0,0,0)$$

$$t_1=(\frac{1}{4},\frac{1}{4},0),\quad t_2=(0,\frac{1}{4},\frac{1}{4}),\quad t_3=(\frac{1}{4},0,\frac{1}{4}),\quad k=18, 19$$

对体心型得到 3 种，为

$$t_1=t_2=t_3=(0,0,0)$$

$$t_1=(0,0,\frac{1}{2}),\quad t_2=(0,0,\frac{1}{2}),\quad t_3=(0,0,0)$$

$$t_1=(0,0,0),\quad t_2=(\frac{1}{2},0,0),\quad t_3=(\frac{1}{2},0,0),\quad k=20, 21, 22$$

下面列出了 C_{2v}类 22 个空间群.

C_{2v}类空间群

空间群 / 非基平移	$C_{2v}^1(Pmm_2)$	$C_{2v}^2(Pmc2_1)$	$C_{2v}^3(Pcc2)$	$C_{2v}^4(Pma2_1)$	$C_{2v}^5(Pca2_1)$	$C_{2v}^6(Pnc2_1)$	$C_{2v}^7(Pmn2_1)$
t_1	$(0,0,0)$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(0,0,0)$	$(\frac{1}{2},0,0)$	$(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2},0,0)$	$(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$
t_2	$(0,0,0)$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(0,0,0)$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(0,0,0)$
t_3	$(0,0,0)$	$(0,0,0)$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2},0,0)$	$(\frac{1}{2},0,0)$	$(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$

非基平移 \ 空间群	$C_{2v}^{8}(Pba2_1)$	$C_{2v}^{9}(Pna2_1)$	$C_{2v}^{10}(Pnn2_1)$	$C_{2v}^{11}(Cmm2)$	$C_{2v}^{12}(Cmc2_1)$	$C_{2v}^{13}(Ccc2)$	$C_{2v}^{14}(Amm2)$
t_1	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$
t_2	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$
t_3	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$

非基平移 \ 空间群	$C_{2v}^{15}(Abm2)$	$C_{2v}^{16}(Ama2)$	$C_{2v}^{17}(Aba2)$	$C_{2v}^{18}(Fmm2)$	$C_{2v}^{19}(Fdd2_1)$	$C_{2v}^{20}(Imm2)$	$C_{2v}^{21}(Iba2_1)$	$C_{2v}^{22}(Ima2_1)$
t_1	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$
t_2	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$
t_3	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$

在上表中可看到国际符号明确地标出了空间群的结构：其中 2 标记 C_2 轴；2_1 标记二重螺旋轴；a，b，c 分别标记在 x，y，z 方向的滑移面；n 标记对角线方向的滑移面. 如 $\boldsymbol{t}_2 = \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3$ 这种滑移面记为 n，d 标记金刚石型的滑移面，这种滑移面与 n 标记的滑移面类似；m 标记反射面.

5.4.2 D_2 类空间群

D_2 群的元素为 $\{e, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}\}$，三个 C_2 轴是完全等价的，因而它的基向量可取 $\|\boldsymbol{a}_1\| = \|\boldsymbol{a}_2\| = \|\boldsymbol{a}_3\|$. 因此 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$ 面上的底心与 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_3$ 面上的底心是等价的. 与 C_{2v} 群不同，不存在两种类型的底心类型点阵. 只有 P，C，F，I 四种类型的点阵.

由关系式

$$\begin{cases} \{C_{2x} \mid \boldsymbol{t}_1\}^2 = \{e \mid C_{2x}\boldsymbol{t}_1 + \boldsymbol{t}_1\} \in T_{D_{2h}}(\Gamma) \\ \{C_{2y} \mid \boldsymbol{t}_2\}^2 = \{e \mid C_{2y}\boldsymbol{t}_2 + \boldsymbol{t}_2\} \in T_{D_{2h}}(\Gamma) \\ \{C_{2z} \mid \boldsymbol{t}_3\}^2 = \{e \mid C_{2z}\boldsymbol{t}_3 + \boldsymbol{t}_3\} \in T_{D_{2h}}(\Gamma) \\ \{C_{2x} \mid \boldsymbol{t}_1\} \cdot \{C_{2y} \mid \boldsymbol{t}_2\} \cdot \{C_{2z} \mid \boldsymbol{t}_3\} \\ \qquad = \{e \mid C_{2x}(C_{2y}\boldsymbol{t}_3 + \boldsymbol{t}_2) + \boldsymbol{t}_1\} \in T_{D_{2h}}(\Gamma) \end{cases} \tag{5.4.12}$$

可确定四种点阵类型的非基本平移向量，它们是

P 型：$\boldsymbol{t}_1 = \boldsymbol{t}_2 = \boldsymbol{t}_3 = (0, 0, 0)$

$$\boldsymbol{t}_1 = (0, 0, 0), \ \boldsymbol{t}_2 = (0, 0, \frac{1}{2}), \ \boldsymbol{t}_3 = (0, 0, \frac{1}{2})$$

$$\boldsymbol{t}_1 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0), \ \boldsymbol{t}_2 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0), \ \boldsymbol{t}_3 = (0, 0, 0)$$

$$\boldsymbol{t}_1 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0), \ \boldsymbol{t}_2 = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), \ \boldsymbol{t}_3 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$$

C 型：$t_1 = t_2 = t_3 = (0, 0, 0)$

$$t_1 = (0, 0, \frac{1}{2}), t_2 = (0, 0, 0), t_3 = (0, 0, \frac{1}{2})$$

F 型：$t_1 = t_2 = t_3 = (0, 0, 0)$

I 型：$t_1 = t_2 = t_3 = (0, 0, 0)$

$$t_1 = (0, 0, \frac{1}{2}), t_2 = (\frac{1}{2}, 0, 0), t_3 = (0, \frac{1}{2}, 0)$$

D_2 类中的空间群如下表：

D_2 类空间群

空间群 / 非基平移	$D_2^1(P222)$	$D_2^2(P222_1)$	$D_2^3(P2_12_12)$	$D_2^4(P2_12_12_1)$
t_1	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
t_2	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
t_3	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$

空间群 / 非基平移	$D_2^5(C222_1)$	$D_2^6(C222)$	$D_2^7(F222)$	$D_2^8(I222)$	$D_2^9(I2_12_12_1)$
t_1	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$
t_2	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$
t_3	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, \frac{1}{2}, 0)$

5.4.3　D_{2h}类空间群

由于 $D_{2h} = D_2 \times C_i = \{e, C_{2x}, C_{xy}, C_{2z}, i, iC_{2x}, iC_{2y}, iC_{2z}\}$，因而空间群 $D_{2h}(\Gamma)^k$ 具有如下形式：

$$\begin{aligned} D_{2h}(\Gamma)^k &= D_2(\Gamma)^k \oplus \{i \mid t\} \cdot D_2(\Gamma)^k \\ &= T_{D_{2h}}(\Gamma) \oplus \{C_{2x} \mid t_1\} \cdot T_{D_{2h}}(\Gamma) \oplus \{C_{2y} \mid t_2\} \\ &\quad \cdot T_{D_{2h}}(\Gamma) \oplus \{C_{2z} \mid t_3\} \cdot T_{D_{2h}}(\Gamma) \oplus \{i \mid t\} \cdot T_{D_{2h}}(\Gamma) \\ &\quad + \{i \mid t\} \cdot \{C_{2x} \mid t_1\} \cdot T_{D_{2h}}(\Gamma) \oplus \{i \mid t\}\{C_{2y} \mid t_2\} \\ &\quad \cdot T_{D_{2h}}(\Gamma) \oplus \{i \mid t\}\{C_{2z} \mid t_3\} \cdot T_{D_{2h}}(\Gamma) \end{aligned} \tag{5.4.13}$$

空间群要求

$$\begin{cases} \{i \mid t\}^2 = \{e \mid it + t\} = \{e \mid \mathbf{0}\} \in D_{2h}(\Gamma) \\ \{i \mid t\} \cdot \{C_{2j} \mid t_j\} = \{iC_{2j} \mid it_j + t\} = \{iC_{2j} \mid t - t_j\} \\ \{iC_{2j} \mid t - t_j\}^2 \in T_{D_{2h}}(\Gamma) \end{cases} \tag{5.4.14}$$

联立求解(5.4.14)式可得到 28 个空间群 $D_{2h}(\Gamma)^k$，如下表：

空间群 *P*-型 $D_{2h}(\Gamma)^k$

非基平移＼空间群	$D_{2h}^1(Pmmm)$	$D_{2h}^2(Pnnn)$	$D_{2h}^3(Pccm)$	$D_{2h}^4(Pban)$	$D_{2h}^5(Pmma)$	$D_{2h}^6(Pnna)$	$D_{2h}^7(Pmna)$
t_1	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$
t_2	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$
t_3	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$
t	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$

非基平移＼空间群	$D_{2h}^8(Pcca)$	$D_{2h}^9(Pbam)$	$D_{2h}^{10}(Pccn)$	$D_{2h}^{11}(Pbcm)$	$D_{2h}^{12}(Pnnm)$	$D_{2h}^{13}(Pmmn)$	$D_{2h}^{14}(Pbcn)$
t_1	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
t_2	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
t_3	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$
t	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$

非基平移＼空间群	$D_{2h}^{15}(Pbca)$	$D_{2h}^{16}(Pnma)$	$D_{2h}^{17}(Cmcm)$	$D_{2h}^{18}(Cmca)$	$D_{2h}^{19}(Cmmm)$	$D_{2h}^{20}(Cccm)$	$D_{2h}^{21}(Cmma)$
t_1	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$
t_2	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$
t_3	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$
t	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2}, 0)$

非基平移＼空间群	$D_{2h}^{22}(Ccca)$	$D_{2h}^{23}(Fmmm)$	$D_{2h}^{24}(Fddd)$	$D_{2h}^{25}(Immm)$	$D_{2h}^{26}(Ibam)$	$D_{2h}^{27}(Ibca)$	$D_{2h}^{28}(Imma)$
t_1	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$
t_2	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$
t_3	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, \frac{1}{2}, 0)$
t	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$

5.5 三角系空间群

三角系(D_{3d})包括 5 个类，即 C_3，S_6，C_{3v}，D_3，D_{3d}，只有一种简单类型的点阵，但是基向量有两种不等价的选取方法. 第一种为 $\| \boldsymbol{a}_1 \| = \| \boldsymbol{a}_2 \|$，$\boldsymbol{a}_1$ 与 $\boldsymbol{a}_2$ 间夹角为$\frac{2\pi}{3}$，$\boldsymbol{a}_3 \perp \boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_3 \perp \boldsymbol{a}_2$，选取 $\boldsymbol{a}_3$ 为三重轴方向，$\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 处于两个反射面上；第二种为 $\| \boldsymbol{a}_1 \| = \| \boldsymbol{a}_2 \| = \| \boldsymbol{a}_3 \|$，相互夹角为$\frac{2\pi}{3}$，分别在三个反射面 σ_v 上. 第一种基向量下的简单型点

阵记为 P 型，第二种通常记为 R 型.

5.5.1　C_3 类空间群和 $S_6 = C_{3i}$类空间群

对 P 型点阵取非基平移为 $\boldsymbol{t} = n\boldsymbol{a}_3$，由

$$\{C_3|\boldsymbol{t}\}^3 = \{e|3\boldsymbol{t}\} \in T_{D_{3d}}(P)$$

可得到 $\boldsymbol{t} = \boldsymbol{0}$，$\frac{1}{3}\boldsymbol{a}_3$，$\frac{2}{3}\boldsymbol{a}_3$，相应的 C_3^2 的非基平移为 $\boldsymbol{t}' = \boldsymbol{0}$，$\frac{2}{3}\boldsymbol{a}_3$，$\frac{1}{3}\boldsymbol{a}_3$，于是得到三个空间群，用 Sch 符号，记为 C_3^1，C_3^2，C_3^3，点群 $S_6 = C_3 \otimes C_i = C_{3i}$. 因而 S_6 类的空间群为

$$C_{3i}^k = C_3^k \oplus \{i|\boldsymbol{t}\} \cdot C_3^k$$

由于

$$\{i|\boldsymbol{t}\} \cdot \{C_3|\boldsymbol{t}_1\} = \{iC_3| -\boldsymbol{t}_1 + \boldsymbol{t}\}, \quad \{i|\boldsymbol{t}\} \cdot \{C_3^2|\boldsymbol{t}_2{}^{-1}\} = \{iC_3| -\boldsymbol{t}_2 + \boldsymbol{t}\}$$

可得到

$$\{iC_3| -\boldsymbol{t}_1 + \boldsymbol{t}\}^2 = \{C_3^2| -C_3\boldsymbol{t} + \boldsymbol{t}\}, \quad \{iC_3^2| -\boldsymbol{t}_2 + \boldsymbol{t}\}^2 = \{C_3| -C_3^2\boldsymbol{t} + \boldsymbol{t}\}$$

这个方程的解只能是 $\boldsymbol{t}_1 = \boldsymbol{t}_2 = \boldsymbol{t} = \boldsymbol{0}$，因而 S_6 类 P 型点阵只有一个空间群.

对 R 型点阵用相似方法可得到 C_3 类和 C_{3i}类，每类只有一个简单空间群.

下面列出这些空间群.

C_3 类和 $S_6(C_{3i})$类空间群

空间群 / 非基平移	$C_3^1(P3)$	$C_3^2(P3_1)$	$C_3^3(P3_2)$	$C_3^4(R3)$	$C_{3i}^1(P\bar{3})$	$C_{3i}^2(R\bar{3})$
$\boldsymbol{t}_1$	(0, 0, 0)	(0, 0, $\frac{1}{3}$)	(0, 0, $\frac{2}{3}$)	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)
$\boldsymbol{t}_2$	(0, 0, 0)	(0, 0, $\frac{2}{3}$)	(0, 0, $\frac{1}{3}$)	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)

5.5.2　C_{3v}类空间群

C_{3v}群有 6 个元素：

$$e, \quad C_3, \quad C_3^2, \quad \sigma_v^{(1)}, \quad \sigma_v^{(2)}, \quad \sigma_v^{(3)}$$

该简单型的空间群有两种点阵：一种三个反射面分别在(0, 1, 0)，(1, 0, 0)，(1, 1, 1)面；另一种三个反射面分别在(1, 1, 0)，(2, 1, 0)，(1, 2, 0)面. 两种结构所得空间群是各自独立的，因而记为 P 型和 R 型两种点阵. 对于 C_{3v}群，由 $\sigma_v^{(1)} \cdot C_3 = \sigma_v^{(3)}$，$\sigma_v^{(2)} \cdot C_3 = \sigma_v^{(1)}$，$\sigma_v^{(3)} \cdot C_3 = \sigma_v^{(1)}$ 等关系，要求

$$\{\sigma_v^{(1)} | \boldsymbol{t}_1\} \cdot \{C_3 | \boldsymbol{t}\} = \{\sigma_v^{(3)} | \boldsymbol{t}_3\}$$
$$\{\sigma_v^{(2)} | \boldsymbol{t}_2\} \cdot \{C_3 | \boldsymbol{t}\} = \{\sigma_v^{(1)} | \boldsymbol{t}_1\}$$
$$\{\sigma_v^{(3)} | \boldsymbol{t}_3\} \cdot \{C_3 | \boldsymbol{t}\} = \{\sigma_v^{(2)} | \boldsymbol{t}_2\}$$

因此可得出

$$\boldsymbol{t} = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{t}_1 = \boldsymbol{t}_2 = \boldsymbol{t}_2 = \frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3$$

对两种点阵共得到 6 种空间群：

C_{3v}类空间群

空间群 / 非基平移	$C_{3v}^1(P3m1)$	$C_{3v}^2(P31m)$	$C_{3v}^3(P3c1)$	$C_{3v}^4(P31c)$	$C_{3v}^5(R3m)$	$C_{3v}^6(R3c)$
$t_1,(t_1')$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$
$t_2,(t_2')$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$
$t_3,(t_3')$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$

上表中对 R 型点阵，t_1'，t_2'，t_3' 为取反射面为(1, 1, 0)，(2, 1, 0)和(1, 2, 0)时，空间群的非基本平移.

5.5.3 D_3 类和 D_{3d}类空间群

D_3 群的元素为

$$e,\quad C_3,\quad C_3^2,\quad C_2^{(1)},\quad C_2^{(2)},\quad C_2^{(3)}$$

三个 C_2 轴可以有两种取法：一种取(0, 1, 0)，(1, 0, 0)，(1, 1, 0)为 $C_2^{(1)}$，$C_2^{(2)}$，$C_2^{(3)}$ 轴，别一种取(1, 1, 0)，(2, 1, 0)，(1, 2, 0)为 $C_2^{(1)'}$，$C_2^{(2)'}$，$C_2^{(3)'}$ 轴. 由于

$$C_3\cdot C_2^{(1)}=C_2^{(2)},\quad C_3\cdot C_2^{(1)}=C_2^{(3)},\quad C_3\cdot C_2^{(2)}=C_2^{(3)}$$

可导出允许的非基本平移为

$$r_1=\begin{cases}0,\\ \frac{1}{3}a_3,\\ \frac{2}{3}a_3,\end{cases}\quad r_2=\begin{cases}0,\\ \frac{2}{3}a_3,\\ \frac{1}{3}a_3,\end{cases}\quad r_3=\begin{cases}0,\\ \frac{2}{3}a_3,\\ \frac{4}{3}a_3,\end{cases}\quad r_4=\begin{cases}0\\ \frac{4}{3}a_3\\ \frac{2}{3}a_3\end{cases}$$

可得到 7 种空间群.

由于 $D_{3d}=D_3\otimes C_i$，可确定出只有 D_3 的简单型才产生空间群，此时 i 个非基平移为 $r_5=0$ 或$\frac{1}{2}a_3$，这些空间群列于下表：

D_3 类空间群

空间群 / 非基平移	$D_3^1(P312)$	$D_3^2(P321)$	$D_3^3(P3_112)$	$D_3^4(P3_121)$	$D_3^5(P3_212)$	$D_3^6(P3_221)$	$D_3^7(R32)$
t_1	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{2}{3})$	$(0, 0, \frac{2}{3})$	$(0, 0, \frac{1}{3})$	$(0, 0, \frac{1}{3})$	(0, 0, 0)
t_2	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{3})$	$(0, 0, \frac{1}{3})$	$(0, 0, \frac{2}{3})$	$(0, 0, \frac{2}{3})$	(0, 0, 0)
t_3	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{2}{3})$	$(0, 0, \frac{2}{3})$	$(0, 0, \frac{1}{3})$	$(0, 0, \frac{1}{3})$	(0, 0, 0)
t_4	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{3})$	$(0, 0, \frac{1}{3})$	$(0, 0, \frac{2}{3})$	$(0, 0, \frac{2}{3})$	(0, 0, 0)

t_1，t_2 为 C_3 和 C_3^2 轴的非基平移. t_3，t_4 为 $C_2^{(2)}$，$C_2^{(1)}$ 的非基本平移，D_3^2，D_3^4 和 D_3^6 是

(1, 1, 0), (2, 1, 0), (1, 2, 0)为 C_2 轴的空间群.

D_{3d}类空间群，由于非基平移$\{i|t\}$与$\{C_3|t_1\}$，$\{C_2^{(i)}|t_i\}$等间的制约，只有六个空间群，即

$$D_{3d}^1(P\bar{3}1m) = D_3^1 \oplus D_3^1 \cdot \{i|(0,0,0)\}$$

$$D_{3d}^2(P\bar{3}1c) = D_3^1 \oplus D_3^1 \cdot \{i|(0,0,\tfrac{1}{2})\}$$

$$D_{3d}^3(P\bar{3}m1) = D_3^2 \oplus D_3^2 \cdot \{i|(0,0,0)\}$$

$$D_{3d}^4(P\bar{3}c1) = D_3^2 \oplus D_3^2 \cdot \{i|(0,0,\tfrac{1}{2})\}$$

$$D_{3d}^5(R\bar{3}m) = D_3^7 \oplus D_3^7 \cdot \{i|(0,0,0)\}$$

$$D_{3d}^6(R\bar{3}c) = D_3^7 \oplus D_3^7 \cdot \{i|(0,0,\tfrac{1}{2})\}$$

5.6　四角系和六角系空间群

对四角系和六角系也是用类似方法确定可能的非基本平移，然后给出空间群，本节不加推导地列出这些结果.

5.6.1　四角系空间群

四角系空间群包括七个类：C_4，S_4，D_4，D_{2d}，C_{4v}，C_{4h}，D_{4h}. 下面列出它们的空间群和非基本平移.

1. C_4 类与 S_4 类

t_1，t_2，t_3 为 C_4，C_4^2，C_4^3 的非基平移. 它们的空间群和基本平移如下表：

C_4 类与 S_4 类空间群

空间群 / 非基平移	$C_4^1(P4)$	$C_4^2(P4_1)$	$C_4^3(P4_2)$	$C_4^4(P4_3)$	$C_4^5(I4)$	$C_4^6(I4_1)$	$S_4^1(P\bar{4})$	$S_4^2(I\bar{4})$
t_1	(0, 0, 0)	$(0,0,\frac{1}{4})$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(0,0\frac{3}{4})$	(0, 0, 0)	$(0,\frac{1}{2},\frac{1}{4})$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)
t_2	(0, 0, 0)	$(0,0,\frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	$(0,0,\frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)
t_3	(0, 0, 0)	$(0,0,\frac{3}{4})$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(0,0,\frac{1}{4})$	(0, 0, 0)	$(0,\frac{1}{2},\frac{1}{4})$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)

2. C_{4h}类

C_{4h}群为

$$C_4 \otimes C_i = \{e, C_4, C_4^2, C_4^3, i, iC_4, iC_4^2, iC_4^3\}$$

有 6 个空间群，非基平移为

$$\{C_4|t_1\}, . \{C_4^3|t_2\}, \quad \{i|t_3\}, \quad \{iC_2|t_4\} = \{\sigma_h|t_4\}$$

下表列出了这些空间群和非基本平移：

C_{4h}类空间群

非基平移 \ 空间群	$C_{4h}^1\left(P4\frac{1}{m}\right)$	$C_{4h}^2\left(P\frac{4_2}{m}\right)$	$C_{4h}^3\left(P\frac{4}{n}\right)$	$C_{4h}^4\left(P\frac{4_2}{n}\right)$	$C_{4h}^5\left(I\frac{4}{m}\right)$	$C_{4h}^6\left(I\frac{4_1}{a}\right)$
t_1	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$
t_2	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$
t_3	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$
t_4	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$

3. D_4 类

D_4 类有 10 个空间群，包括五个非基本平移：

$$\{C_4 \mid t_1\}, \quad \{C_2^{(1)} \mid t_2\}, \quad \{C_2^{(2)} \mid t_3\}, \quad \{C_2^{(3)} \mid t_4\}, \{C_2^{(4)} \mid t_5\}$$

而$\{C_4^2|t\}$和$\{C_4^3|t'\}$可由$\{C_4|t_1\}$导出. D_4 类的 10 个空间群和相应的非基本平移列于下表：

D_4 类空间群

非基平移 \ 空间群	$D_4^1(P422)$	$D_4^2(P42_12)$	$D_4^3(P4_122)$	$D_4^4(P4_12_12)$	$D_4^5(P4_222)$
t_1	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{4})$	$(0, 0, \frac{1}{4})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$
t_2	(0, 0, 0)	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	(0, 0, 0)	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	(0, 0, 0)
t_3	(0, 0, 0)	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{3}{4})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$
t_4	(0, 0, 0)	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	(0, 0, 0)
t_5	(0, 0, 0)	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{4})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$

非基平移 \ 空间群	$D_4^6(P4_22_12)$	$D_4^7(P4_322)$	$D_4^8(P4_32_12)$	$D_4^9(I422)$	$D_4^{10}(I4_122)$
t_1	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{3}{4})$	$(0, 0, \frac{3}{4})$	(0, 0, 0)	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$
t_2	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	(0, 0, 0)	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	(0, 0, 0)	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$
t_3	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{4})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)
t_4	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$
t_5	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{3}{4})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4})$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)

4. C_{4v}类

C_{4v}类有 12 个空间群，也包括五个非基平移：

$$\{C_4 \mid t_1\}, \quad \{\sigma_v^{(i)} \mid t_{i+1}\}, \quad i = 1, 2, 3, 4$$

$\{C_4^2|t_4\}$和$\{C_4^3|t_5'\}$由$\{C_4|t_1\}$确定. 下表列出了这些空间群和非基本平移：

C_{4v}类空间群

空间群 / 非基平移	$C_{4v}^1(P4mm)$	$C_{4v}^2(P4bm)$	$C_{4v}^3(P4_2cm)$	$C_{4v}^4(P4_2nm)$	$C_{4v}^5(P4cc)$	$C_{4v}^6(P4nc)$
t_1	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$
t_2	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
t_3	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
t_4	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
t_5	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
空间群 / 非基平移	$C_{4v}^7(P4_2mc)$	$C_{4v}^8(P4_2bc)$	$C_{4v}^9(I4mm)$	$C_{4v}^{10}(I4cm)$	$C_{4v}^{11}(I4_1md)$	$C_{4v}^{12}(I4_1cd)$
t_1	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$
t_2	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4})$
t_3	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$
t_4	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4})$
t_5	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$

5. D_{2d}类

D_{2d}群有 8 个元素：

$$e,\quad C_2^{(1)},\quad C_2^{(2)},\quad C_2^{(3)},\quad S_4,\quad S_4^3,\quad \sigma_d^{(1)},\quad \sigma_d^{(2)}$$

点阵有两种结构：一种是$(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)(0, 0, 1)$为二重轴, $(\bar{1}10)$, $(1, 1, 0)$为反射面, $(0, 0, 1)$为旋转反射轴S_4和S_4^3；第二种是$(0, 0, 1)$, $(\bar{1}10)$, $(1, 1, 0)$为二重轴, $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$为反射面$(0, 0, 1)$为旋转反射轴. 包括四种非基本平移，第一种情况为

$$\{C_2^1 \mid t_1\},\quad \{C_2^2 \mid t_2\},\quad \{\sigma_d^{(1)} \mid t_3\},\quad \{\sigma_d^{(2)} \mid t_4\}$$

有 8 个空间群；第二种为

$$\{C_2^{(1)} \mid t_1'\},\quad \{C_2^{(2)} \mid t_2'\},\quad \{\sigma_d^{(1)} \mid tn_3'\},\quad \{\sigma_d^{(2)} \mid t_4'\}$$

有 4 个空间群. 现把这些空间群和非基本平移列于下表：

D_{2d}类空间群

空间群 / 非基平移	D_{2d}^1 $(P\bar{4}2m)$	D_{2d}^2 $(P\bar{4}2c)$	D_{2d}^3 $(P\bar{4}2_1m)$	D_{2d}^4 $(P\bar{4}2_1c)$	D_{2d}^9 $(I\bar{4}m2)$	D_{2d}^{10} $(I\bar{4}c2)$	D_{2d}^{11} $(I\bar{4}2m)$	D_{2d}^{12} $(I\bar{4}2d)$
t_1	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4})$
t_2	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4})$
t_3	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4})$
t_4	$(0, 0, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(0, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4})$

非基平移 \ 空间群	D_{2d}^5 ($P\bar{4}m2$)	D_{2d}^6 ($P\bar{4}c2$)	D_{2d}^7 ($P\bar{4}b2$)	D_{2d}^8 ($P\bar{4}n2$)
t_1'	$(0,0,0)$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
t_2'	$(0,0,0)$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
t_3'	$(0,0,0)$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
t_4'	$(0,0,0)$	$(0,0,\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$

6. D_{4h}类

点群 $D_{4h}=D_4\otimes C_i$，因而 D_{4h}类空间群可由 D_4 类空间群 D_4^k 与 $\{i|t\}$ 的直积构成：

$$D_{4h}^k = D_4^P \oplus D_4^D \otimes \{i\mid t\}$$

由于群元素的制约关系，限定了 D_{4h}^k只有 20 种. 下面给出了 D_{4h}类空间群：

$$D_{4h}^1(P4/mmm) = D_4^1 \oplus D_4^1 \cdot \{i\mid (0,0,0)\}$$

$$D_{4h}^2(P4/mcc) = D_4^1 \oplus D_4^1 \cdot \{i\mid (0,0,\tfrac{1}{2})\}$$

$$D_{4h}^3(P4/nbm) = D_4^{(1)} \oplus D_4^{(1)} \cdot \{i\mid (\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},0)\}$$

$$D_{4h}^4(P4/nnc) = D_4^{(1)} \oplus D_4^{(1)} \cdot \{i\mid (\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})\}$$

$$\left.\begin{array}{l} D_{4h}^5(P4/mbm) \\ D_{4h}^6(P4/mnc) \\ D_{4h}^7(P4/nmm) \\ D_{4h}^8(P4/ncc) \end{array}\right\} = D_4^2 \oplus D_4^{(2)} \cdot \left\{\begin{array}{l} \{i\mid (0,0,0)\} \\ \{i\mid (0,0,\tfrac{1}{2})\} \\ \{i\mid (\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},0)\} \\ \{i\mid (\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})\} \end{array}\right.$$

$$\left.\begin{array}{l} D_{4h}^9(P4_2/mmc) \\ D_{4h}^{10}(P4_2/mcm) \\ D_{4h}^{11}(P4_2/nbc) \\ D_{4h}^{12}(P4_2/nnm) \end{array}\right\} = D_4^5 \oplus D_4^5 \cdot \left\{\begin{array}{l} \{i\mid (0,0,0)\} \\ \{i\mid (0,0,\tfrac{1}{2})\} \\ \{i\mid (\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},0)\} \\ \{i\mid (\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})\} \end{array}\right.$$

$$\left.\begin{array}{l} D_{4h}^{13}(P4_2/mbc) \\ D_{4h}^{14}(P4_2/mnm) \\ D_{4h}^{15}(P4_2/nmc) \\ D_{4h}^{16}(P4_2/ncm) \end{array}\right\} = D_4^6 \oplus D_4^6 \cdot \left\{\begin{array}{l} \{i\mid (0,0,0)\} \\ \{i\mid (0,0,\tfrac{1}{2})\} \\ \{i\mid (\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},0)\} \\ \{i\mid (\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})\} \end{array}\right.$$

$$\left.\begin{array}{l} D_{4h}^{17}(I4/mmm) \\ D_{4h}^{18}(I4/mcm) \\ D_{4h}^{19}(I4_1/amb) \\ D_{4h}^{20}(I4_1/acd) \end{array}\right\} = \begin{cases} D_4^9 \oplus D_4^9 \cdot \begin{cases} \{i \mid (0,0,0)\} \\ \{i \mid (0,0,\frac{1}{2})\} \end{cases} \\ D_4^{10} \oplus D_4^{10} \cdot \begin{cases} \{i \mid (0,0,0)\} \\ \{i \mid (0,0,\frac{1}{2})\} \end{cases} \end{cases}$$

5.6.2　六角系空间群

六角系包括 C_{3h}, D_{3h}, C_6, C_{6h}, C_{6v}, D_6, D_{6h}七个类，26 个空间群. 下面分别给出它们的空间群和非基本平移.

1. C_{3h}, C_6, C_{6h}, C_{6v}类

C_6 类有 5 个非基本平移：$\{C_6|\boldsymbol{t}_1\}$, $\{C_6^2|\boldsymbol{t}_2\}$, $\{C_6^3|\boldsymbol{t}_3\}$, $\{C_6^4|\boldsymbol{t}_4\}$, $\{C_6^5|\boldsymbol{t}_5\}$. 下面给出 C_{3h}和 C_6 类的空间群：

C_{3h}和 C_6 类的空间群和非基本平移

非基平移 \ 空间群	$C_{3h}^1(P\bar{6})$	$C_6^1(P6)$	$C_6^2(P6_1)$	$C_6^3(P6_5)$	$C_6^4(P6_2)$	$C_6^5(P6_4)$	$C_6^6(P6_3)$
t_1	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{5}{6})$	$(0, 0, \frac{1}{6})$	$(0, 0, \frac{4}{6})$	$(0, 0, \frac{2}{6})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$
t_2	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{4}{6})$	$(0, 0, \frac{2}{6})$	$(0, 0, \frac{2}{6})$	$(0, 0, \frac{4}{6})$	(0, 0, 0)
t_3	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{2})$
t_4	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{2}{6})$	$(0, 0, \frac{4}{6})$	$(0, 0, \frac{4}{6})$	$(0, 0, \frac{2}{6})$	(0, 0, 0)
t_5	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	$(0, 0, \frac{1}{6})$	$(0, 0, \frac{5}{6})$	$(0, 0, \frac{2}{6})$	$(0, 0, \frac{4}{6})$	$(0, 0, \frac{1}{2})$

C_{6h}群为直积群，$C_{6h}=C_6\otimes C_i$，C_{6h}类的空间群只有两个：

$$C_{6h}^1(P6/m) = C_6^1 \oplus C_6^1 \cdot \{i \mid (0,0,0)\}$$

$$C_{6h}^2(P6_3/m) = C_6^6 \oplus C_6^6 \cdot \{i \mid (0,0,0)\}$$

C_{6v}类包括 4 个空间群，它们为

$$C_{6v}^1(P6mm) = C_6^1 \oplus C_6^1 \cdot \{\sigma_v \mid (0,0,0)\}$$

$$C_{6v}^2(P6cc) = C_6^1 \oplus C_6^1 \cdot \{\sigma_v \mid (0,0,\frac{1}{2})\}$$

$$C_{6v}^3(P6_3cm) = C_6^6 \oplus C_6^6 \cdot \{\sigma_v \mid (0,0,\frac{1}{2})\}$$

$$C_{6v}^4(P6_3mc) = C_6^6 \oplus C_6^6 \cdot \{\sigma_v \mid (0,0,0)\}$$

2. D_{3h}, D_6 和 D_{6h}类

D_{3h}为直积群，$D_{3h}=D_3\otimes C_3$，因而 D_{3h}类的空间群为三角系空间群 D_3^k 与$\{\sigma|\boldsymbol{t}\}$的直积，共有四个空间群，它们为

$$D_{3h}^1(P\bar{6}m2) = D_3^1 \oplus D_3^1 \cdot \{\sigma \mid (0,0,0)\}$$

$$D_{3h}^2(\bar{P}6c2) = D_3^1 \oplus D_3^1 \cdot \{\sigma \mid (0,0,\frac{1}{2})\}$$

$$D_{3h}^3(P\bar{6}2m) = D_3^2 \oplus D_3^2 \cdot \{\sigma \mid (0,0,0)\}$$

$$D_{3h}^4(P\bar{6}2c) = D_3^2 \oplus C_3^2 \cdot \{\sigma_v \mid (0,0,\frac{1}{2})\}$$

D_6 群包括一个不变子群 C_6，因而 D_6 群可表示为不变子群 C_6 和它的陪集之直和：

$$D_6 = \{C_6\} \oplus C_2\{C_6\}$$

因而 D_6 类空间群也可由 C_6 类空间群构成，它们为

$$D_6^1(P622) = C_6^1 \oplus C_6^1 \cdot \{C_2 \mid (0,0,0)\}$$

$$D_6^2(P6_122) = C_6^2 \oplus C_6^2 \cdot \{C_2 \mid (0,0,0)\}$$

$$D_6^3(P6_522) = C_6^3 \oplus C_6^3 \cdot \{C_2 \mid (0,0,0)\}$$

$$D_6^4(P6_222) = C_6^4 \oplus C_6^4 \cdot \{C_2 \mid (0,0,0)\}$$

$$D_6^5(P6_422) = C_6^5 \oplus C_6^5 \cdot \{C_2 \mid (0,0,0)\}$$

$$D_6^6(P6_322) = C_6^6 \oplus C_6^6 \cdot \{C_2 \mid (0,0,0)\}$$

D_{6h}类包括四个空间群，由于 $D_{6h} = D_6 \times C_i$，因而 D_{6h}类的空间群为

$$D_{6h}^1(P6/mmm) = D_6^1 \oplus D_6^1 \cdot \{i \mid (0,0,0)\}$$

$$D_{6h}^2(P6/mcc) = D_6^1 \oplus D_6^1 \cdot \{i \mid (0,0,\frac{1}{2})\}$$

$$D_{6h}^3(P6_3/mcm) = D_6^6 \oplus D_6^6 \cdot \{i \mid (0,0,\frac{1}{2})\}$$

$$D_{6h}^4(P6_3/mmc) = D_6^6 \oplus D_6^6 \cdot \{i \mid (0,0,0)\}$$

5.7 立方系空间群

立方系包括 5 个类，即 T, O, T_d, T_h 和 O_h 类. 下面分别进行讨论.

5.7.1 T 类空间群

T 类空间群是整个 O_h 系空间群的基础. 其它类的空间群都是在 T 类空间群基础之上产生的. 因而在本节中对 T 类空间群进行推演.

1. P 型点阵

对于 P 型点阵，三个基矢取为 $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$，它们相互垂直，且长度相等，即

$$\|\boldsymbol{a}_1\| = \|\boldsymbol{a}_2\| = \|\boldsymbol{a}_3\|, \boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_3 \perp \boldsymbol{a}_1$$

它们分别为三个二重轴. 为了表示非基本平移，取

$$C_2^{(1)} = \alpha_2, \quad C_2^{(2)} = \alpha_3, \quad C_2^{(3)} = \alpha_4$$

$$C_3^{(1)} = \alpha_5, \quad C_3^{(2)} = \alpha_6, \quad C_3^{(3)} = \alpha_7, \quad C_3^{(4)} = \alpha_8$$

于是非基本平移可记为

$$t_i = n_i a_1 + m_i a_2 + l_i a_3, \quad i=2,3,4,5,6,7,8 \tag{5.7.1}$$

因而

$$\begin{aligned} \{\alpha_i \mid t_i\}^2 &= \{e \mid \alpha_i t_i + t_i\} \in T_{O_h}(P), \quad i=2,3,4 \\ \{\alpha_i \mid t_i\}^3 &= \{e \mid \alpha_i^2 t_i + \alpha_i t_i + t_i\} \in T_{O_h}(P), \quad i=5,6,7,8 \end{aligned} \tag{5.7.2}$$

由于二重旋转轴对三个轴的作用为

$$C_2^{(1)}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ -a_2 \\ -a_3 \end{pmatrix}, \quad C_2^{(1)}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_1 \\ a_2 \\ -a_3 \end{pmatrix}, \quad C_2^{(3)}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_1 \\ -a_2 \\ -a_3 \end{pmatrix}$$

因此由(5.7.2)的第一式得到

$$n_i = \begin{cases} 0, \\ \frac{1}{2}, \end{cases} \quad m_i = \begin{cases} 0, \\ \frac{1}{2}, \end{cases} \quad l_i = \begin{cases} 0, \\ \frac{1}{2}, \end{cases} \quad i=2,3,4 \tag{5.7.3}$$

另一方面

$$\{\alpha_2 \mid t_2\}\{\alpha_3 \mid t_3\}\{\alpha_4 \mid t_4\} = \{e \mid \alpha_2\alpha_3 t_4 + \alpha_2\alpha_3 t_3 + t_2\} \in T_{O_h}(P) \tag{5.7.4}$$

由此得到

$$n_2 + n_3 - n_4 = \begin{cases} 0, \\ 1, \end{cases} \quad m_2 - m_3 - m_4 = \begin{cases} 0, \\ 1, \end{cases} \quad l_2 - l_3 + l_4 = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} \tag{5.7.5}$$

联立(5.7.3)和(5.7.5)式，可得到两组独立的非基本平移向量

$$\begin{aligned} &t_2 = t_3 = t_4 = \mathbf{0} \\ &t_2 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \quad t_3 = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad t_4 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \tag{5.7.6}$$

这里所谓独立的非基本平移向量，是指它们给出了互不同构的空间群，如

$$t_2 = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad t_3 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \quad t_4 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$$

它们给出的空间群与前面给出的是同构的.

群元素 $C_3^{(i)}$, $C_3^{(i)2}$ 作用于基向量，得到

$$\alpha_5\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_3 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \alpha_6\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_3 \\ -a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \alpha_7\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_3 \\ a_1 \\ -a_2 \end{pmatrix}, \quad \alpha_8\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_3 \\ -a_1 \\ -a_2 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_5^2\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_2 \\ a_3 \\ a_1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_6^2\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_2 \\ a_3 \\ -a_1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_7^2\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_2 \\ -a_3 \\ -a_1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_8^2\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_2 \\ -a_3 \\ a_1 \end{pmatrix}$$

由(5.7.2)第二式得到

$$\{C_3^{(1)} \mid t_5\} = \{e \mid (n_5 + m_5 + l_5)(a_1 + a_2 + a_3)\} \in T_{O_h}$$

注意，由$(n_5 + m_5 + l_5)(a_1 + a_2 + a_3)$为 T_{O_h} 中最短的平移容易看到

$$n_5 = m_5 = l_5 = 0$$

而

$$\{C_3^{(2)} \mid \boldsymbol{t}_6\}^3 = \{e \mid n_6(\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_3) + m_6(-\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_3 + \boldsymbol{a}_2) + l_6(-\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3)\} \in T_{O_h}$$

$$\{C_3^{(3)} \mid \boldsymbol{t}_7\}^3 = \{e \mid n_7(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_3) + m_7(-\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_3 + \boldsymbol{a}_2) + l_7(-\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3)\} \in T_{O_h}$$

$$\{C_3^{(4)} \mid \boldsymbol{t}_8\}^3 = \{e \mid n_8(\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3) + m_8(-\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_3 + \boldsymbol{a}_2) + l_8(\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3)\} \in T_{O_h}$$

由此得到两组非基本平移向量

$$\boldsymbol{t}_5 = \boldsymbol{t}_6 = \boldsymbol{t}_7 = \boldsymbol{t}_8 = \boldsymbol{0},$$

$$\boldsymbol{t}_5 = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{t}_6 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0), \quad \boldsymbol{t}_7 = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), \quad \boldsymbol{t}_8 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$$

由上述讨论得到了两个 P 型空间群如下表所示：

空间群 / 非基平移	$T^1(P23)$	$T^4(P2_13)$
$\boldsymbol{t}_2$	(0, 0, 0)	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
$\boldsymbol{t}_3$	(0, 0, 0)	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
$\boldsymbol{t}_4$	(0, 0, 0)	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$
$\boldsymbol{t}_5$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)
$\boldsymbol{t}_6$	(0, 0, 0)	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
$\boldsymbol{t}_7$	(0, 0, 0)	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
$\boldsymbol{t}_8$	(0, 0, 0)	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$

2. F 型和 I 型空间群

F 型点阵基向量为

$$\boldsymbol{a}_1' = \frac{1}{2}(\boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3), \quad \boldsymbol{a}_2' = \frac{1}{2}(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_3), \quad \boldsymbol{a}_3' = \frac{1}{2}(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2)$$

经过类似计算可得到只存在 $\boldsymbol{t}_i = \boldsymbol{0}$ 的简单空间群

$$T^2(F23) = T_{O_h}(F) \oplus \sum_{\alpha \in T} \{\alpha \mid \boldsymbol{0}\} \cdot T_{O_h}(F)$$

I 型点阵基向量为

$$\boldsymbol{a}_1' = \boldsymbol{a}_1, \quad \boldsymbol{a}_2' = \boldsymbol{a}_2, \quad \boldsymbol{a}_3' = (\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3)$$

经过类似计算可得到两种空间群如下表所示：

非基平移 \ 空间群	$T^3(I23)$	$T^5(I2_13)$
t_2	$(0,0,0)$	$(0,0,\frac{1}{2})$
t_3	$(0,0,0)$	$(\frac{1}{2},0,0)$
t_4	$(0,0,0)$	$(0,\frac{1}{2},0)$
t_5	$(0,0,0)$	$(0,0,0)$
t_6	$(0,0,0)$	$(0,\frac{1}{2},0)$
t_8	$(0,0,0)$	$(\frac{1}{2},0,0)$

5.7.2　O，T_h，T_d 和 O_h 类空间群

1. O 类空间群

T 群是 O 群的不变子群，O 群可表示为 T 群和它的陪集的直和：

$$O = T \oplus C_2^{(i)} \cdot T$$

因而 O 类空间群也具有这种结构，即

$$O^k(\Gamma) = T^P(\Gamma) \oplus \{C_i | t_p\} \cdot T^P(\Gamma)$$

经过对非基本平移 t_p 的相似计算可得到 8 个 O 类空间群如下：

$$O^1(P432) = T^1 \oplus T^1 \cdot \{C_2 | (0,0,0)\}$$

$$O^2(P4_232) = T^1 \oplus T^1 \cdot \{C_2 | (\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})\}$$

$$O^3(F432) = T^2 \oplus T^2 \cdot \{C_2 | (0,0,0)\}$$

$$O^4(F4_132) = T^2 \oplus T^2 \cdot \{C_2 | (\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})\}$$

$$O^5(I432) = T^3 \oplus T^3 \cdot \{C_2 | (0,0,0)\}$$

$$O^6(P4_332) = T^4 \oplus T^4 \cdot \{C_2 | (\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})\}$$

$$O^7(P4_132) = T^4 \oplus T^4 \cdot \{C_2 | (\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4})\}$$

$$O^8(I4_132) = T^5 \oplus T^5 \cdot \{C_2 | (\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})\}$$

2. T_h 类空间群

T_h 群为直积群，$T_h = T \otimes I$，因而它们也具有这种直积结构，即

$$T_h^k = T_{(\Gamma)}^P \oplus T^P(\Gamma) \otimes \{i | t_p\}$$

经具体计算可得到非基本平移 t_p，最后得到 7 个空间群如下：

$$T_h^1(Pm3) = T^1 \oplus T^1 \cdot \{i | (0,0,0)\}$$

$$T_h^2(Pn3) = T^1 \oplus T^1 \cdot \{i \mid (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\}$$

$$T_h^3(Fm3) = T^2 \oplus T^2 \cdot \{i \mid (0, 0, 0)\}$$

$$T_h^4(Fd3) = T^2 \oplus T^2 \cdot \{i \mid (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})\}$$

$$T_h^5(Im3) = T^3 \oplus T^3 \cdot \{i \mid (0, 0, 0)\}$$

$$T_h^6(Pa3) = T^4 \oplus T^4 \cdot \{i \mid (0, 0, 0)\}$$

$$T_h^7(Ia3) = T^5 \oplus T^5 \cdot \{i \mid (0, 0, 0)\}$$

3. T_d 类空间群

T_d 群与 O 群同构，T_d 类共六个空间群，它们为

$$T_d^1(P\bar{4}3m) = T^1 \oplus T^1 \cdot \{S_4 \mid (0, 0, 0)\}$$

$$T_d^4(P\bar{4}3n) = T^1 \oplus T^1 \cdot \{S_4 \mid (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\}$$

$$T_d^2(F\bar{4}3m) = T^2 \oplus T^2 \cdot \{S_4 \mid (0, 0, 0)\}$$

$$T_d^5(F\bar{4}3c) = T^2 \oplus T^2 \cdot \{S_4 \mid (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\}$$

$$T_d^3(I\bar{4}3m) = T^3 \oplus T^3 \cdot \{S_4 \mid (0, 0, 0)\}$$

$$T_d^6(I\bar{4}3d) = T^5 \oplus T^5 \cdot \{S_4 \mid (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})\}$$

4. O_h 类空间群

O_h 为直积群，$O_h = O \otimes I$，因而 O_h 群也有直积结构，它们为

$$O_h^1(Pm3m) = O^1 \oplus O^1 \cdot \{i \mid (0, 0, 0)\}$$

$$O_h^2(Pn3n) = O^1 \oplus O^1 \cdot \{i \mid (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\}$$

$$O_h^3(Pm3n) = O^2 \oplus O^2 \cdot \{i \mid (0, 0, 0)\}$$

$$O_h^4(Pn3m) = O^2 \oplus O^2 \cdot \{i \mid (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\}$$

$$O_h^5(Fm3m) = O^3 \oplus O^3 \cdot \{i \mid (0, 0, 0)\}$$

$$O_h^6(Fm3c) = O^3 \oplus O^3 \cdot \{i \mid (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\}$$

$$O_h^7(Fd3m) = O^4 \oplus O^4 \cdot \{i \mid (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})\}$$

$$O_h^8(Fd3c) = O^4 \oplus O^4 \cdot \{i \mid (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})\}$$

$$O_h^9(Im3m) = O^5 \oplus O^5 \cdot \{i \mid (0, 0, 0)\}$$

$$O_h^{10}(Ia3d) = O^5 \oplus O^5 \cdot \{i \mid (0, 0, 0)\}$$

在上面这些空间群中，反演元素 i 的非基本平移或 S_4，C_2 等的非基本平移与 T 类空间群的非基本平移要相互制约，因而只存在前面这些空间群.

比如 $O^5 = T^3 \oplus T^3 \cdot \{C_2|(0,0,0)\}$，由它产生的 O_h 类空间群为

$$O_h^k = O^5 \oplus O^5 \otimes \{i|\boldsymbol{t}\}$$
$$= T^3 \oplus T^3 \cdot \{C_2|(0,0,0)\} + T^3 \otimes \{i|\boldsymbol{t}\} \oplus T^3 \cdot \{C_2|(0,0,0)\} \cdot \{i|\boldsymbol{t}\}$$

而

$$\{C_2|(0,0,0)\} \cdot \{i|\boldsymbol{t}\} = \{C_2|\boldsymbol{t}\} \cdot \{i|\boldsymbol{0}\}$$

但是在 O^5 群中 $\{C_2|\boldsymbol{t}\}$ 只允许 $\boldsymbol{t}=\boldsymbol{0}$，因而这种空间群 O_h^k 只可能存在 $\{i|(0,0,0)\}$，即空间群 O_h^9. T_d^k 类比 O^k 类少两个空间群也是这种制约造成的.

对空间群结构的详细讨论可参阅 Kovalev 专著“Irreducible Representations of the Space Groups”.

5.8　周期性边界条件与平移群的有限化

前面讨论的空间群的 Bravais 点阵是充满无限空间的，即点阵格点

$$\boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3,\quad -\infty < n_i < \infty \text{ 的整数或 } 0$$

规则的排列在整个空间中，因而空间群的平移子群是无穷阶的. 可以引入周期性边界条件(或称 Born 周期性边界条件)，使平移子群有限化.

实际上这种周期性边界条件相当于有限范围内规则分布的点阵. 而这种 Bravais 点阵内只有 $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ 个元胞，由于 N_1, N_2, N_3 都很大，可忽略边界上的影响，而令 $N_i\boldsymbol{a}_i$ 等价于 $\boldsymbol{a}_i$，即

$$\{e|\boldsymbol{0}\} = \{e|\boldsymbol{a}_i\}^{N_i},\quad i = 1, 2, 3 \tag{5.8.1}$$

因而

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}_n + \boldsymbol{R}_{n'} &= (n_1 + n_1')\boldsymbol{a}_1 + (n_2 + n_2')\boldsymbol{a}_2 + (n_3 + nn_3')\boldsymbol{a}_3 \\ &\equiv (n_1 + n_1' - N_1)\boldsymbol{a}_1 + (n_2 + n_2' - N_2)\boldsymbol{a}_2 + (n_3 + nn_3' - N_3)\boldsymbol{a}_3\end{aligned} \tag{5.8.2}$$

而当 $n_i + n_i' > N_i$ 时，等价于 $n_i + n_i' - N_i$.

在这种边界条件下，可能的独立的平移只有 $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ 个，因而把平移子群转化成了有限平移群. 通常取

$$-\frac{N_i}{2} < n_i \leqslant \frac{N_i}{2}$$

N_i 为偶数. 格点向量为

$$\boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3,\quad -\frac{N_i}{2} < n_i \leqslant \frac{N_i}{2} \tag{5.8.3}$$

5.9　空间群的推广——Shubnikov 群

空间群描述物理体系质量分布的空间对称性，如果物理体系的密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ 在空间群 G 的所有元素 $\{\boldsymbol{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}$ 作用下保持不变，即

$$\{\boldsymbol{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\} \cdot \rho(\boldsymbol{r}) = \rho(\{\boldsymbol{\alpha}_i|\boldsymbol{t}_i\}^{-1} \cdot \boldsymbol{r}) = \rho(\boldsymbol{r})$$

则说明物理体系具有空间群 G 的对称性. 然而有的物理体系的性质并不能仅仅由密度函数 $\rho(\boldsymbol{r})$ 描述. 如磁性晶体，它的原子(离子)具有一定自旋，由自旋产生磁矩，因而须用自旋函数 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})$ 描述物理体系性质. 对于这类由一定物理量构成的向量场 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$，可引入线性变换 $\{\hat{R}_i|\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}$，$\hat{R}_i$ 为向量场 $\boldsymbol{A}$ 所在空间的点变换，$\{\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}$ 为 $\boldsymbol{r}$ 空间的线性变换，当 $\{\boldsymbol{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}$ 作用于 $\boldsymbol{r}$ 引起 $\boldsymbol{r}$ 变换时，相应向量 $\boldsymbol{A}$ 不变，而 $\hat{R}_i$ 使 $\boldsymbol{A}$ 发生转动，即

$$\{\hat{R}_i|\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})=\hat{R}_i\cdot\boldsymbol{A}(\{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}^{-1}\boldsymbol{r})=\hat{R}_i\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')$$

$$\boldsymbol{r}'=\{\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}^{-1}\cdot\boldsymbol{r}=\hat{\alpha}_i^{-1}\cdot\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_i \tag{5.9.1}$$

(5.9.1)式写成分量式为

$$\{\hat{R}_i\mid\hat{\alpha}_i\mid\boldsymbol{\tau}_i\}\cdot A_\alpha(\boldsymbol{r})=\sum_\beta R_{i\alpha\beta}A_\beta(\{\hat{\alpha}_i\mid\boldsymbol{\tau}_i\}^{-1}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{5.9.1'}$$

向量 $\boldsymbol{A}$ 空间和坐标空间的线性变换 $\{\hat{R}_i|\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}$ 之积为

$$\{\hat{R}_i|\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}\cdot\{\boldsymbol{R}_j|\hat{\alpha}_j|\boldsymbol{\tau}_j\}=\{\hat{R}_i\cdot\hat{R}_j|\hat{\alpha}_i\cdot\hat{\alpha}_j|\boldsymbol{\tau}_i+\hat{\alpha}_i\cdot\boldsymbol{\tau}_j\} \tag{5.9.2}$$

这个积中的空间平移部分为空间群元素之积 $\{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}\cdot\{\alpha_j|\boldsymbol{\tau}_j\}=\{\alpha_i\alpha_j|\boldsymbol{\tau}_i+\alpha_i\boldsymbol{\tau}_j\}$ 中的平移向量. 显然这种乘法满足结合律. 如果取 $\hat{R}_i=\hat{e}$(向量空间的单位元)，$\hat{\alpha}_i=\hat{e}'$(坐标空间的单位元)，$\boldsymbol{\tau}_i=\boldsymbol{0}$，则 $\{\hat{e}|\hat{e}'|\boldsymbol{0}\}$ 为向量-坐标空间的单位元，元素 $\{\hat{R}_i|\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}^{-1}=\{\hat{R}_i^{-1}|\hat{\alpha}_i^{-1}|-\alpha_i^{-1}\boldsymbol{\tau}_i\}$ 与 $\{\hat{R}_i|\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}$ 互为逆元素. 因而它构成一个群.

我们只讨论向量 $\boldsymbol{A}$ 为自旋的情况，自旋为 $SU(2)$ 空间的 2 维旋量，同构于 $\mathbf{R}^3$ 空间的向量 $\boldsymbol{S}$，因而为 $SU(2)\otimes\mathbf{R}^3$ 空间的变换群. 如果自旋与轨道空间完全没有耦合，即自旋完全独立地变化，此时 $\boldsymbol{R}_i$ 为自旋空间($SU(2)$空间)的变换群，即 $SU(2)$ 群，与 $\mathbf{R}^3$ 空间的点变换 $\hat{\alpha}_i$ 无关系，于是这种群变为直积群 $SU(2)\otimes G$(G 为空间群)或称为自旋空间群. 如果自旋附着在原子或离子上，并随原子或离子转动而转动，则自旋与轨道空间发生耦合，使自旋空间与轨道空间耦合为一个体系，$\hat{R}_i$ 与 $\hat{\alpha}_i$ 相重合，于是变换为 $\{\hat{\alpha}_i|\hat{\alpha}_j|\boldsymbol{\tau}_i\}$，即

$$\{\hat{\alpha}_i|\hat{\alpha}_j|\boldsymbol{\tau}_i\}\cdot\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})=\hat{\alpha}_i\cdot\boldsymbol{S}(\{\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{\tau}_i\}^{-1}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{5.9.3}$$

则为自旋-轨道空间的双值空间群.

自旋向量 $\boldsymbol{S}$ 与空间向量 $\boldsymbol{r}$ 的几何性质并不完全相同，空间向量 $\boldsymbol{r}$ 在空间反演 i 作用下变为 $-\boldsymbol{r}$，即 $i\boldsymbol{r}=-\boldsymbol{r}$. 但是自旋在空间反演下保持不变，即 $i\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}$，因而一般称 $\boldsymbol{S}$ 为空间反演下的赝向量. 因而在计算(5.9.3)式时一定要注意到 $i\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}$ 的赝向量性质. 也就是说，如果 $\hat{R}_i$ 为一般的旋转($\det R_i=1$)，则 $\hat{R}_i\boldsymbol{S}$ 的变化规则与向量 $\boldsymbol{r}$ 相同，但是若 $\hat{R}_i=i\cdot\hat{R}_i'$，此时 $\hat{R}_i\boldsymbol{S}=\hat{R}_i'\cdot i\boldsymbol{S}=\hat{R}_i'\boldsymbol{S}$，而一般向量 $\boldsymbol{r}$ 则为 $\hat{R}_i\boldsymbol{r}=\hat{R}_i'\cdot i\boldsymbol{r}$. 因而为了把赝向量 $\boldsymbol{S}$ 也视为向量，点变换的规则应改写为

$$(\det\hat{R}_i)\hat{R}_i\boldsymbol{S}=\begin{cases}\hat{R}_i\boldsymbol{S}, & \text{当 } \det R_i=1 \text{ 时}\\ -\hat{R}_i\boldsymbol{S}, & \text{当 } \det R_i=-1 \text{ 时}\end{cases} \tag{5.9.4}$$

于是

$$\{\hat{\alpha}_i|\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}\cdot\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})=(\det\hat{\alpha}_i)\alpha_i\boldsymbol{S}(\{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{5.9.5}$$

对于自旋(或磁矩)在量子理论中还涉及时间反演变换. 第三章中已指出时间反演算子 $\hat{K}_0$ 是一反酉变换,它对自旋的作用为 $\hat{K}_0\boldsymbol{S}=-\boldsymbol{S}$, 而对空间向量 $\boldsymbol{r}$ 的作用为 $\hat{K}_0\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}$, 因而自旋向量 $\boldsymbol{S}$ 在时间反演下为一般向量, 而空间向量 $\boldsymbol{r}$ 在时间反演下为赝向量.

为了描述自旋在时间-空间中的变换性质, 在上述讨论的变换群中增加时间反演变换 $\hat{K}_0$, 于是得到 Shubnikov 群, 由于自旋 $\boldsymbol{S}$ 决定了物质的磁性, 因而 Shubnikov 群可以描述磁性物质的对称性, 这个群的元素除作用于旋轨空间的元素 $\{\alpha_i|\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}$ 外, 还有时间反演算子 $\hat{K}_0$, 而且 $\hat{K}_0$ 与全部 $\{\alpha_i|\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}$ 都交换.

显然 Shubnikov 群在结构上与第一类点群增加一个空间反演算子 i 之后构成第二类点群是完全相似的. 因而对于 Shubnikov 群存在与定理 2. 5. 1 相似的定理.

定理 5. 9. 1　对于空间群 G(或点群 G)加入时间反演元素 $\hat{K}_0$ 而构成的 Shubnikov 群 G_s, 只能有两种类型.

第一种是含有独立时间反演元素 K_0 的 Shubnikov 群 G_s, 它的结构为直积群,

$$G_s=G\otimes K,\quad K\text{ 为时间反演群},\quad K=\{E,\ K_0\}$$

G 为产生这种 Shubnikov 群 G_s 的空间群或点群.

第二种是不含有独立元素 $\hat{K}_0$ 的 Shubnikov 群 G_s, 它同构于一个普通的空间群(或点群)G, G 存在一个指数为 2 的不变子群 H, 记子群 H 的陪集为 H', 则 G_s 为

$$G_s=H\cup\{\hat{K}_0H'\}=H\oplus\{\hat{K}_0H'\}$$

陪集 H'可写为 $H'=G-H$, 于是

$$G_s=H\oplus\hat{K}_0(G-H)\tag{5.9.6}$$

这个定理可与定理 2. 4. 1 平行的证明, 因而就不讨论了.

第一类 Shubnikov 群, 由于有元素 $\hat{K}_0$ 存在, 它作用于自旋 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})$ 为

$$\hat{K}_0(\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}))=\hat{K}_0\boldsymbol{S}(\hat{K}_0\boldsymbol{r})=\hat{K}_0\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})=-\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})$$

因而物质如果具有这类 Shubnikov 群的对称性, 总自旋一定为 0, 即

$$\sum\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{0}$$

因而自旋按一定规则分布于整个空间, 在 $\boldsymbol{r}$ 处自旋为 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})$, 一定存在某一 $\boldsymbol{r}'$处的自旋为 $(-\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}))$, 这种物质一般为顺磁介质. 而第二类 Shubnikov 群由于没有独立的 $\hat{K}_0$ 存在, 所以没有可描写铁磁性或反铁磁性物质.

Shubnikov 群包括 Shubnikov 点群(或称为色点群)和 Shubnikov 空间群(或称色空间群), 下面分别讨论它们.

5. 9. 1　Shubnikov 点群

Shubnikov 点群又称色点群. 因为原子或离子具有向上或向下的磁矩(即自旋), 可认为是两种颜色的离子. 自旋向上的为白色, 向下的为黑色. 如果把普通点群也放入 Shubnikov 点群之中, 根据定理 5. 9. 1, 这种点群共三类: 第一类为普通晶体学点群, 共有 32 个, 第二类为

$$G_s = G\otimes\{e,\ \hat{K}_0\} = G\oplus\hat{K}_0\otimes G \tag{5.9.7}$$

因而也是32个Shubnikov点群，G_s阶是G阶的2倍，如$G=\{e_1, g_2, g_3, \cdots, g_n\}$，则

$$G_s = \{e_1, g_2, \cdots, g_n, \hat{K}_0, \hat{K}_0 g_2, \cdots, \hat{K}_0 g_n\}$$

一般称为灰色点群，因为$\hat{K}_0$把黑色离子变为白色离子，这表明这种点群所描述的物理体系一定是黑色和白色离子数目相同，并且按点群G对称性规则分布，总体上看来即不是白色也不是黑色，而是黑白相间的灰色.

第三类Shubnikov点群为

$$G_s = H\oplus\hat{K}_0(G-H) \tag{5.9.8}$$

在32个晶体学点群G中，找出全部含有指数为2的不变子群H，就可构造出全部这类Shubnikov点群G_s，一共有58个. 这种点群又称为黑白点群. 因为这类Shubnikov点群可用来描述物质的磁性，也称为Shubnikov磁点群.

下面举一简例具体说明磁点群$4'/m$所描写的自旋体系，并借以说明磁点群国际符号的命名方法.

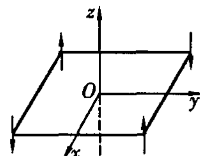


图5.9.1 自旋体系的对称性

如图5.9.1所示，一个由具有自旋(↑或↓)的四个相同原子所构成的体系. 当不考虑自旋时体系具有D_{4h}的对称性；当考虑自旋时，D_{4h}对称性受到了破坏. 因为把体系绕z轴转$\frac{\pi}{2}$，S_1变为S_2，而S_2与S_1方向相反.

但是这个体系具有D_{2h}的对称性，

$$D_{2h} = \{E,\ C_x(\pi),\ C_y(\pi),\ C_z(\pi),\ i,$$
$$iC_x(\pi) = \sigma_x,\ iC_y(\pi) = \sigma_y,\ iC_z(\pi) = \sigma_z\}$$

显然$C_x(\pi)$，$C_y(\pi)$，$C_z(\pi)$保持系对称性，由于$iS=S$，因而三个反射面也保持体系的对称性. D_{2h}为D_{4h}的指数为2的不变子群，它的陪集为

$$\{C_z(\frac{\pi}{2}),\ C_z(\frac{\pi}{2})^3,\ iC_z(\frac{\pi}{2}) = S_4(z),\ iC_z(\frac{\pi}{2})^3 = S_4(z)^3,$$
$$C_2(1,1),\ C_2(1,\bar{1}),\ iC_2(11) = \sigma_v^{(1)},\ iC_2(1\bar{1}) = \sigma_v^{(2)}\}$$

$(1,1)$和$(1,\bar{1})$分别表示两个C_2轴在x-y平面上的坐标. 显然它们都破坏体系中自旋S的对称性，但是若乘以$\hat{K}_0$，则$\hat{K}_0(D_{4h}-D_{2h})$中全部元素保持体系不变. 例如$K_0 C_z(\frac{\pi}{2})S_1 = S_2$，因为$\hat{K}_0 S = -S$，即得到了保持自旋体系对称性的Shubnikov点群$D_{2h}\oplus K_0\cdot(D_{4h}-D_{2h})$，用国际符号记为$4'/m$群.

作为磁点群的第二个例子，是点群C_{2v}(国际符号为$2mm$)，它有两个指数为2的不变子群$C_2(2)$和$C_s(m)$，因子C_{2v}群对这两个不变子群的陪集分别为

$$\{C_{2v}-C_2\} = \{\sigma_v^{(1)},\ \sigma_v^{(2)}\},\quad \{C_{2v}-C_s\} = \{C_2,\ \sigma_v^{(2)}\}$$

由它们可构成两个Shubnikov磁点群，即

$$C_2\oplus K_0(C_{2v}-C_2) = 2m'm',\quad C_s\oplus K(C_{2v}-C_s) = 2m'm'$$

由上面三个磁点群的例子，可看出Shubnikov磁点群国际符号的一般命名规则.

磁点群 $4'/m$ 同构于点群 D_{4h}，D_{4h}的国际符号为$\dfrac{4}{m}$，(4 代表四重轴，m 代表五个反射面)，而由它的不变子群 D_{2h}的陪集($D_{4h}-D_{2h}$)乘以时间反演 K_0 构成磁点群时，出现了元素(K_0C_4)，这种元素记为 $4'$，因而磁点群记为 $4'/m$.

由 C_{2v}的不变子群 C_2 的陪集$\{C_{2v}-C_2\}=\{\sigma_v^{(1)},\sigma_v^{(2)}\}$乘以 K_0 构成磁点群时，出现了元素 $K_0\sigma_v^{(1)}$，$K_0\sigma_v^{(2)}$，因而 C_{2v}群的国际符号 $2mm$ 变为 $2m'm'$，m 在国际符号中代表反射面，m'代表元素 $K_0\sigma$.

上述规则是磁点群的一般规则，即与点群 G 同构的磁点群 G_s 的国际符号是把 G 群的国际符号中出现(K_0g)的相应符号加上“′”,改为 g'.

下面在表 5.9.1 中给出了 58 个磁点群的结构和国际符号.

表 5.9.1　Shubnikov 磁点群

系	点群 G			指数为 2 的子群 H		shubnikov 磁点群 G_s
	Sch 符号	国际符号	阶	Sch 符号	国际符号	
三斜系	C_1	1	1			
	C_i	$\bar{1}$	2	C_1	1	$\bar{1}'$
单斜系	C_{1h}	m	2	C_1	1	m'
	C_2	2	2	C_1	1	$2'$
	C_{2h}	$\dfrac{2}{m}$	4	C_2 C_i C_{1h}	2 $\bar{1}$ m	$2/m'$ $2'/m'$ $2'/m$
正交系	C_{2v}	$2mm$	4	C_{1h} C_2	m 2	$2m'm'$ $2m'm'$
	D_2	(222)	4	C_2	2	$2'2'2$
	D_{2h}	mmm	8	C_{2h} C_{2v} D_2	$2/m$ $2mm$ 222	$m'm'm$ $m'mm$ $m'm'm$
四角系	C_4	4	4	C_2	2	$4'$
	S_4	$\bar{4}$	4	C_2	2	$\bar{4}'$
	C_{4h}	$4/m$	8	C_4 S_4 C_{2h}	4 4 $\bar{2}/m$	$4/m'$ $4'/m'$ $4'/m$
	D_{2d}	$\bar{4}2m$	8	C_{2v} D_2 S_4	$2mm$ 222 $\bar{4}$	$\bar{4}'2'm$ $\bar{4}'2m'$ $\bar{4}2'm'$
	C_{4v}	$4mm$	8	C_{2v} C_4	$2mm$ 4	$4'mm'$ $4m'm'$
	D_4	422	8	D_2 C_4	222 4	$4'22'$ $42'2'$
	D_{4h}	$4/m$	16	D_{2h} C_{4v} D_{2d} C_{4h} D_4	mmm $4mm$ $\bar{4}2m$ $4/m$ 422	$(4'/m)mm'$ $(4/m')mm$ $(4'/m)m'm$ $(4/m)m'm'$ $(4/m')m'm'$

系	点群 G			指数为2的子群 H		shubnikov 磁点群 G_s
	Sch 符号	国际符号	阶	Sch 符号	国际符号	
三角系	C_3	3	3			
	S_6	$\bar{3}$	C_3	C_3	3	$\bar{3}'$
	C_{3v}	$3m$	6	C_3	3	$3m'$
	D_3	32	6	C_3	3	$32'$
	D_{3d}	$\bar{3}m$	12	S_6 C_{3v} D_3	$\bar{3}$ $3m$ 32	$\bar{3}m'$ $\bar{3}'m$ $\bar{3}'m'$
六角系	C_{3h}	$\bar{6}$	6	C_3	3	$\bar{6}'$
	C_6	6	6	C3	3	$6'$
	C_{6a}	$6/m$	12	S_6 C_6 C_{3h}	$\bar{3}$ 6 $\bar{6}$	$6'/m'$ $6/m'$ $6'/m$
	D_{3h}	$\bar{6}2m$	12	C_{3v} D_3 C_{3h}	$3m$ 32 $\bar{6}$	$\bar{6}'m2'$ $\bar{6}'m'2$ $\bar{6}2'm'$
	C_{6v}	$6mm$	12	C_{3v} C_6	$3m$ 6	$6'm'm$ $6m'm'$
	D_6	622	12	D_3 C_6	32 6	$6'2'2$ $62'2'$
	D_{6h}	$(6/m)mm$	24	D_{3d} D_{3h} C_{6h} C_{6v} D_6	$\bar{3}m$ $\bar{6}2m$ $6/m$ $6mm$ 622	$(6'/m)m'm$ $(6'/m)mm'$ $(6/m)m'm'$ $(6/m')mm$ $(6/m')m'm'$
立方系	T	23	12			
	T_h	m_3	24	T	23	$m'3$
	T_d	$\bar{4}3m$	24	T	23	$\bar{4}'3m'$
	O	432	24	T	23	$4'32'$
	O_h	$m3m$	48	O T_h T_d	432 m_3 $\bar{4}3m$	$m'3m'$ $m3m'$ $m'3m'$

5.9.2 Shubnikov 空间群

对于 Shubnikov 空间群，如果把普通空间群也列入 Shubnikov 空间群中的一类，按定理 5.9.1 也可分为三类：第一类为一般空间群 230 个，第二类为一般空间群 G 与时间反演群的直积，即

$$G_s = G \oplus \hat{K}_0 \cdot G \tag{5.9.9}$$

也为 230 个，一般称为灰色空间群.

第三类形如

$$G_s = H \oplus \hat{K}_0 \cdot (G - H) \tag{5.9.10}$$

这种 Shubnikov 空间群分为两种.

第一种是空间群 G 的指数为 2 的不变子群 H 的平移子群 T_h，也是空间群 G 的平移

子群，因而 G 的不变子群 H 的陪集只能是 $\tilde{G}=\{\alpha_i|t_i\}\cdot H$，$t_i$，为非基本平移或 $t_i\neq0$. 于是这类 Shubnikov 空间群为

$$G_s=H\oplus\hat{K}_0\{\alpha_i|t_i\}\cdot H \tag{5.9.11}$$

这类 Shubnikov 空间群的特点是与通常空间群 G 有相同的 Bravais 点阵（即相同的平移子群 T_h），这类 Shubnikov 群共 674 个.

第三类 Shubnikov 群的第二种具有形式

$$G_s=H\oplus\hat{K}_0\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot H \tag{5.9.12}$$

G_s 与空间群 G 同构，H 是指数为 2 的 G 的不变子群，$\boldsymbol{t}$ 为一平移向量. 空间群 H 的平移子群 T_h 构成一种 Bravais 点阵，而 $\hat{K}_0\{e|\boldsymbol{t}\}\otimes H$ 产生另一种点阵. 令

$$\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\in H,\quad \{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}\in H$$

则

$$\hat{K}_0\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\in G_s,\quad \hat{K}_0\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}\in G_s$$

因而

$$K_0\cdot\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\cdot\hat{K}_0\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}\in G_s$$

然而

$$\begin{aligned}
&K_0\cdot\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\cdot\hat{K}_0\cdot\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}\\
&=\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\cdot\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}\\
&=\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot\{e|\alpha_1\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\cdot\{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}\\
&=\{e|\boldsymbol{t}+\alpha_1\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\cdot\{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}
\end{aligned}$$

（在得到此式时利用了 $\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\cdot\{e|\boldsymbol{t}\}=\{e|\alpha_1\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}$），这表明 $\{e|\alpha_1\boldsymbol{t}+\boldsymbol{t}\}$ 属于空间群 H 的平移子群 T_h，即

$$\{e|\alpha_1\boldsymbol{t}+\boldsymbol{t}\}\in T_h \tag{5.9.13}$$

另一方面

$$\begin{aligned}
&\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\cdot\hat{K}_0\cdot\{e|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}\\
&=\hat{K}_0\cdot\{e|\alpha_1\boldsymbol{t}\}\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\cdot\{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}\\
&=\{e|\alpha_1\boldsymbol{t}-\boldsymbol{t}\}\cdot\hat{K}_0\{e|\boldsymbol{t}\}\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\cdot\{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}\in G_s
\end{aligned}$$

因而

$$\{e|\alpha_1\boldsymbol{t}-\boldsymbol{t}\}\in T_h \tag{5.9.14}$$

由(5.9.13)和(5.9.14)得到

$$\{e|\alpha_1\boldsymbol{t}+\boldsymbol{t}\}\{e|\alpha_1\boldsymbol{t}-\boldsymbol{t}\}\in T_h=\{e|2\alpha_1\boldsymbol{t}\}\in T_h$$

这表明

$$\{e|2\boldsymbol{t}\}\in T_h \tag{5.9.15}$$

即

$$\boldsymbol{t}=\frac{1}{2}(n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3),\quad n_1,n_2,n_3=0\text{ 或 }1 \tag{5.9.16}$$

以上讨论说明群 H 除了由基向量 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 构成的点阵，其格点为

$$\boldsymbol{R}_n=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3,\quad n_1,\ n_2,\ n_3\ 为正负整数或\ 0$$

之外还包括格点

$$\boldsymbol{R}_m'=\boldsymbol{t}+m_1\boldsymbol{a}_1+m_2\boldsymbol{a}_2+m_3\boldsymbol{a}_3,\quad m_1,\ m_2,\ m_3\ 为正负整数或\ 0$$

称格点 $\boldsymbol{R}_n$ 为白色格点，格点 $\boldsymbol{R}_m'$为黑色格点，由黑色格点和白色格点构成的黑白点阵为这类 Shubnikov 群(也称为黑白空间群)的点阵. 由于 $H\oplus\{e|\boldsymbol{t}\}\otimes H$ 是与 Shubnikov 群同构的普通空间群，因而上述黑白点阵，当不考虑格点颜色时也是 14 种 Bravais 点阵之一. 在这种限制下，由(5. 9. 15)式可能的 $\boldsymbol{t}$ 在原白色格点的点阵中增加允许的黑色格点，把 Shubnikov 群的点阵增加到 36 种，在图 5. 9. 2 中给出了这些点阵的元胞图. 每一个黑白点阵的元胞，当忽略黑点和白点的区别时，都仍然是 14 种 Bravais 点阵之一，黑白元胞变成了几个无色元胞的堆积. 在表 5. 9. 2 中给出了黑白点阵平移向量 $\boldsymbol{t}$ 的构成. 这些黑白点阵共给出 517 个 Shubnikov 空间群.

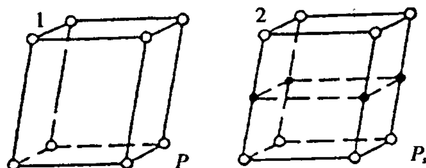
表 5. 9. 2 黑白点阵与平移矢 $\boldsymbol{t}$

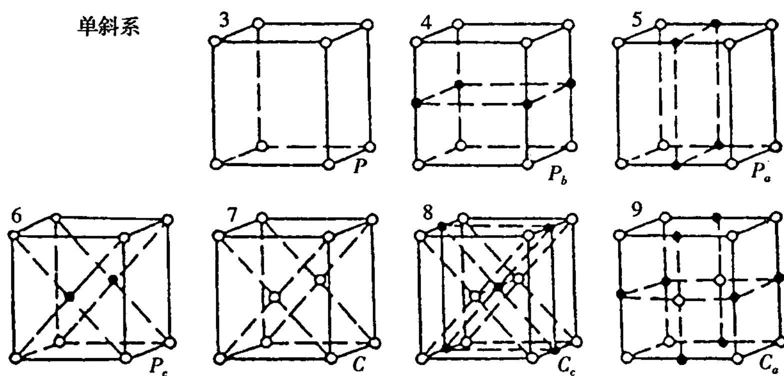
晶 系	普通晶格型 式	黑、白晶格型式	t_0
三斜系	P	P_s	$\frac{1}{2}a_1$
单斜系	P	P_a	$\frac{1}{2}a_3$
		P_b	$\frac{1}{2}a_2$
		P_c	$\frac{1}{2}(a_2+a_3)$
	C	C_c	$\frac{1}{2}a_1$
		C_a	$\frac{1}{2}(a_2+a_3)^*$
正交系	P	P_c	$\frac{1}{2}a_3$
		P_a	$\frac{1}{2}a_2$
		P_O	$\frac{1}{2}(a_1+a_2)$
		P_A	$\frac{1}{2}(a_1+a_3)$
		P_I	$\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$
	C	C_c	$\frac{1}{2}a_3$
		C_a	$\frac{1}{2}(a_1+a_2)^*$
		C_A	$\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$

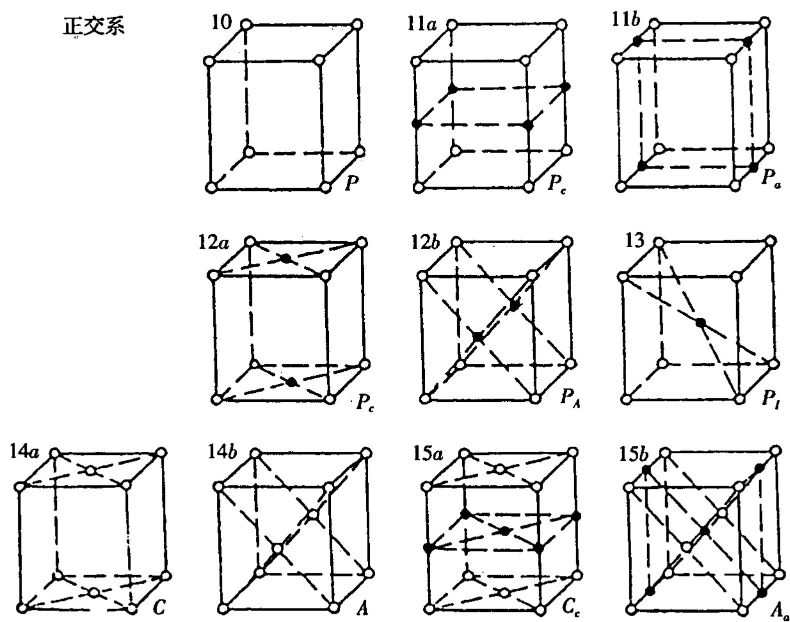
晶 系	普通晶格型 式	黑、白晶格型式	t_0
正交系	$P(b)$	A_a	$\frac{1}{2}a_2$
		A_c	$\frac{1}{2}(a_1+a_3)^*$
		A_c	$\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$
	F	F	$\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$
	I	I_c	$\frac{1}{2}(a_1+a_2)$
四方系	P	P_c	$\frac{1}{2}a_3$
		P_O	$\frac{1}{2}(a_1+a_2)$
		P_I	$\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$
	I	I_c	$\frac{1}{2}(a_1+a_2)$
三角系	R	R_I	$\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$
六角系	P	P_c	$\frac{1}{2}a_3$
立方系	P	P_I	$\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$
		F_s	$\frac{1}{2}(a_1+a_2+a_3)$
	I	-	-

因而 Shubnikov 空间群一共有 1651 个：其中 230 个普通空间群，230 个(5. 9. 11)式描述的第二类 Shubnikov 空间群(亦称灰色空间群)，674 个(5. 9. 12)式描述的第三类 Shubnikov 空间群，517 个第三类第二种黑白磁空间群.

三斜系


1
P
2
P_s


单斜系
3
P
4
P_b
5
P_a
6
P_c
7
C
8
C_c
9
C_a


正交系
10
P
11a
P_c
11b
P_a
12a
P_c
12b
P_A
13
P_I
14a
C
14b
A
15a
C_c
15b
A_a

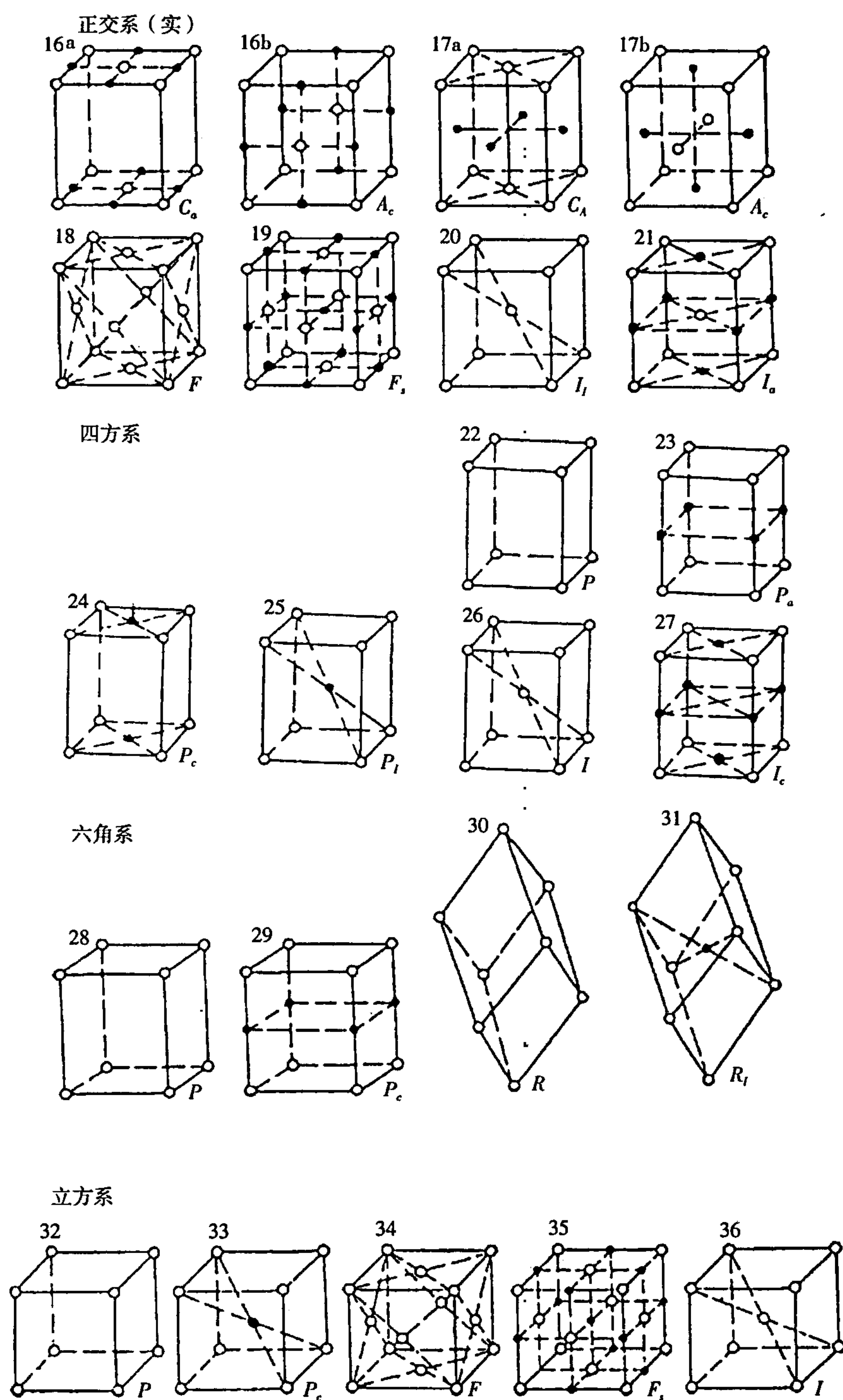


图 5.9.2 黑白点阵的元胞

5.10　Shubnikov 空间群举例

为了具体说明 Shubnikov 空间群，在本节中作为例子给出了三斜系和单斜系 C_2 类的 Shubnikov 空间群.

5.10.1　三斜系 Shubnikov 空间群

1. 三斜系 Shubnikov 空间群的元胞

图 5.9.2 给出了三斜系的两种点阵的元胞，第一个是普通空间群的简单型，三斜系元胞(P)；第二个是在简单型元胞基础上加入$\{e|\boldsymbol{t}\}$产生的黑白点阵的元胞(P_s)，此时

$$\boldsymbol{t}=\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3\quad\left(\boldsymbol{t}=\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{t}=\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2,\ \text{与之同构}\right)$$

若

$$\boldsymbol{t}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2)\quad\text{或}\quad\boldsymbol{t}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_2)$$

则已不是三斜系的 Bravais 点阵了，因而是不允许的. 当去掉颜色，P_s 是三斜系简单点阵的两个元胞.

2. Shubnikov 空间群举例

三斜系 Shubnikov 空间群共有两类. C_1 类共有 3 个空间群，第一个是普通空间群 $C_1^1(P1)$，第二个是灰色空间群.

$$P1'=P1\oplus\hat{K}_0\cdot P1$$

第三个是黑白空间群

$$P_s1=P1\oplus\hat{K}_0\cdot\{e|\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3\}\cdot P1$$

C_i 类 Shubnikov 空间群有 4 个，第一个是普通空间群 $C_i^1(P\bar{1})$，第二个是

$$P\bar{1}'=P\bar{1}\oplus P\bar{1}\cdot\hat{K}_0$$

由于 $P1$ 是 $P\bar{1}$ 的不变子群，因而第三个 Shubnikov 空间群是

$$P\bar{1}i'=P1\oplus\hat{K}_0\cdot\{i|\boldsymbol{0}\}\cdot P1$$

第四个是

$$P_s\bar{1}'=P\bar{1}\oplus\hat{K}_0\{e|\frac{1}{2}\boldsymbol{a}\}\cdot P\bar{1}$$

5.10.2　单斜系 Shubnikov 空间群

1. 单斜系 Shubnikov 空间群的元胞

普通空间群有两种类型 P 型和 C 型的点阵，它们的元胞如图 5.9.2 所示. 由$\{e|\boldsymbol{t}\}$把这两种元胞扩展为 7 种. 对 P 型元胞当 $\boldsymbol{t}=\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3$，$\boldsymbol{t}=\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{t}=\frac{\boldsymbol{a}_3+\boldsymbol{a}_2}{2}$产生图 5.9.2 中的

P_a、P_b、P_c 三种元胞. 对 C 型元胞，当 $t=\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1$，$t=\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3)$时，产生 C_c 和 C_a 两种. 这些元胞当去掉颜色时，P_a 和 P_b 是两个 P 型元胞，P_c 变为 C 型元胞，C_a 为四个 P 型元胞的堆积，C_c 为两个 C 型元胞的堆积.

2. *单斜系 C_2 类 Shubnikov 空间群*

单斜系包括 C_2，C_s 和 C_{2h}三个类，共 91 个 Shubnikov 空间群，作为例子，下面给出 C_2 类 17 个 Shubnikov 空间群的结构.

C_2 类 Shubnikov 空间群

空间群	元胞类型	结　构	空间群	元胞类型	结　构
$P2$	P	$T_{2h}(P)\oplus\{C_2\vert 0\}\otimes T_{2h}(P)$	P_a2_1	P_a	$P2_1\oplus\hat{K}_0\cdot\{e\vert\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3\}\otimes P2_1$
$P2_1'$	P	$P2\oplus\hat{K}_0\otimes P2$	$Pb2_1$	Pb	$P2_1\oplus\hat{K}_0\otimes\{e\vert\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2\}\otimes P2_1$
$P2'$	P	$P1\oplus\hat{K}_0\{C_2\vert 0\}\otimes P1$	P_c2_1	P_c	$P2_1\oplus\hat{K}_0\otimes\{e\vert\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3)\}\otimes P2_1$
P_a2	P_a	$P2\oplus\hat{K}_0\{e\vert\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1\}\otimes P2$	C_2	C	$T_{2h}(C)\oplus\{C_2\vert 0\}\otimes T_{2h}$
P_b2	P_b	$P2\oplus\hat{K}_0\{e\vert\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2\}\otimes P2$	C_21'	C	$C2\oplus\hat{K}_0\otimes C2$
P_c2	P_c	$P2\oplus\hat{K}_0\{e\vert\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3\}\otimes P2$	C_2'	C	$T_{2h}(C)\oplus\hat{K}_0\cdot\{C_2\vert 0\}\times T_{2h}(C)$
$P2_1$	P	$T_{2h}(P)\oplus\{C_2\vert\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3\}\otimes T_{2h}(P)$	C_c2	C_c	$C2\oplus\hat{K}_0\cdot\{e\vert\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1\}\otimes C2$
$P2_11'$	P	$P2_1\oplus\hat{K}_0\otimes P2_1$	C_a2	C_a	$C2\oplus\hat{K}_0\cdot\{e\vert\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3\}\otimes C2$
$P2_11'$	P	$P1\oplus\hat{K}_0\cdot\{C_2\vert\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3\}\otimes P1$			

这里只对 Shubnikov 空间群做些简要的说明，对这种空间群的详细讨论，可参阅 Bradley C J and Cracknell A P 的专著“The mathematieal theory of symmetry in solids: Representation theory for point groups and space groups oxford clerendon paess, 1972”和论文 Bradley C J and Davics B L, “Magnetic Groups and their Corepresentations” Rev. Mod Phys 40, 359(1968).

5.11　空间群小结

空间群是由 R_3 空间中有限平移构成的非齐次线性变换构成的对称群，它可描述空间点阵的对称性. 空间群 G^k 元素为$\{\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{t}_i\}$，对空间向量的作用为

$$\{\hat{\alpha}_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot\boldsymbol{r}=\hat{\alpha}_i\cdot\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}_i$$

空间群 G^k 的平移子群为 $T_{G_b}=\{e|\boldsymbol{R}_n\}$，在一定基向量 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 之下，

$$\boldsymbol{R}_n=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3$$

构成空间点阵的格点. 全部$\{\alpha_i|\mathbf{0}\}$构成空间群G^k的点子群，它是32个晶体学点群之一. 空间群G^k元素$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}\}$中出现的全部$\{\alpha_i\}$也构成一个群，也是32个晶体学点群之一，在前面已记为点群G. 点阵具有点群G的对称性，即

$$\hat{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{R}_n = \boldsymbol{R}_n \in T_G, \quad \alpha_i \in G$$

而且所有点阵都具有空间反演对称性，即

$$i\boldsymbol{R}_n = -\boldsymbol{R}_n \in T_G$$

因而所有具有空间群对称性的空间点阵可分七个系列，它们分别具有C_i，C_{2h}，D_{2h}，D_{4h}，D_{3d}，D_{6h}和O_h的对称性(这些点群均包括空间反演i). 这些系列中的每一个点阵(称Bravais点阵)又具有一定的对称类型，即简单型(P)，底心型(C)，面心型(F)和体心型(I). 这些不同类型的Bravais点阵共14个. 而每一个系列又包括若干点群，它们为代表系列的点群G_m的子群，每一个子群按允许的非基本平移，构造出空间群. 因而空间群间的关系可表示为：

系→点阵类型→类→具体空间群(由非基本平移决定)

本章中已按系、型、类给出32个空间群类的230个空间群构造表，表中同时标出Sch.符号和国际符号. 有星号者为简单空间群共73个，它们的结构为

$$G^k(\Gamma) = T_{G_b}(\Gamma) \oplus \sum_{\alpha \in G} \{\alpha | \mathbf{0}\} \otimes T_{G_b}(\Gamma)$$

其它为非简单空间群，结构为

$$G^k(\Gamma) = T_{G_b}(\Gamma) + \sum_{\alpha \in \overline{G}} \{\alpha | \mathbf{0}\} \otimes T_{G_b}(\Gamma) + \sum_{\alpha_i \in (G - \overline{G})} \{\alpha_i | t_i\} \otimes T_{G_b}(\Gamma)$$

为157个.

当物理体系的空间对称性不仅决定于密度分布函数$\rho(\boldsymbol{r})$，而决定于向量函数$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})$时，如自旋或磁矩，这种向量函数是空间反演的赝向量，即$i\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{S}(i\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{S}(-\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{S}$，是时间反演的极向量，即$\hat{K}_0\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})$. 对于这种空间-时间对称性，可把32个晶体学点群和230个空间群在对称操作中增加时间反演$\hat{K}_0$后推广为Shubnikov群，本章简单介绍了Shubnikov群. Shubnikov点群G_S共有三类，即

(1) $G_S = G$. 在这种情况下，Shubnikov点群G_S即为普通点群.

(2) $G_S = G \oplus G \otimes \hat{K}_0$. 这种结构的Shubnikov点群也为32个. 这类Shubnikov点群的特征是包括独立的元素$\hat{K}_0$.

(3) $G_S = H \oplus \hat{K}_0 \otimes \overline{H} = H \oplus \hat{K}_0 \otimes (G - H)$，即如果点群$G$存在一个指数为2的不变子群$H$，则可生成与$G$同构的Shubnikov点群$G_S$，它的结构为$H$群与点群$G$的陪集$\overline{H} = (G - H)$与时间反演的直积$\hat{K}_0 \otimes \overline{H}$的直和. 这种Shubnikov点群有58个，两种Shubnikov点群共90个. 如果把普通点群也作为Shubnikov点群的特殊类型，也可以说Shubnikov点群为122个.

Shubnikov 空间群的点阵变为黑白点阵，这种点阵由 14 个没有颜色的 Bravais 点阵推广为 36 种黑白点阵.

Shubnikov 空间群有四种类型：

（1）不包括时间反演 $\hat{K}_0$ 的 Shubnikov 空间群，也就是普通空间群为 230 个，即

$$G(\Gamma)_S^k = G(\Gamma)^k$$

以 S 代表 Shubnikov 空间群.

（2）$G(\Gamma)_S^k = G(\Gamma)^k \oplus \hat{K}_0 \otimes G(\Gamma)^k$. 这类 Shubnikov 空间群的特点是：包括独立元素空间反演 $\hat{K}_0$，它们为 230 个.

（3）$G(\Gamma)_S^k = H \oplus \hat{K}_0 \otimes \bar{H}$. H 为 $G(\Gamma)^k$ 的指数为 2 的不变子群，$\bar{H}$ 为 $G(\Gamma)^k$ 的陪集，$\bar{H} = G(\Gamma)^k - H$. 这类 Shubnikov 空间群为 674 个.

（4）$G(\Gamma)_S^k = H \oplus \hat{K}_0 \otimes \{e | t_0\} \otimes H$. H 为 $G(\Gamma)_S^k$ 的指为 2 的不变子群，t_0 为黑白点阵中的一种平移. 这类空间群为 517 个.

总计 Shubnikov 空间群为 1651 个（包括 230 个普通空间群）.

第六章　空间群的表示理论

在本章中首先讨论平移群的不可约表示，从而引入倒易空间和波矢向量. 由波矢向量的对称性引入空间群 G^P 的小子群 G_k^P 以及波矢向量星 $\{k^*\}$. 然后从小群的诱导表示理论对空间群的不可约表示的构成进行仔细研究，并简要讨论了空间群在能带理论中的应用.

6.1　平移群的不可约表示与波矢空间

6.1.1　平移群的不可约表示与波矢向量

空间群 G^k 的平移子群 $T_{G_b}=\{\{e|\boldsymbol{R}_n\}\}$，是不变子群，$G_b$ 为点群 G 所属晶系的最大点群. 在基向量 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 的坐标系中，$\boldsymbol{R}_n$ 为

$$\boldsymbol{R}_n=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3 \tag{6.1.1}$$

因而

$$\{e|\boldsymbol{R}_n\}=\{e|\boldsymbol{a}_1\}^{n_1}\cdot\{e|\boldsymbol{a}_2\}^{n_2}\cdot\{e|\boldsymbol{a}_3\}^{n_3} \tag{6.1.2}$$

引入周期性边界条件

$$\begin{cases}\{e|\boldsymbol{a}_1\}^{N_1}=\{e|\boldsymbol{0}\}\\ \{e|\boldsymbol{a}_2\}^{N_2}=\{e|\boldsymbol{0}\}\\ \{e|\boldsymbol{a}_3\}^{N_3}=\{e|\boldsymbol{0}\}\end{cases} \tag{6.1.3}$$

N_1，N_2，N_3 分别为点阵在 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$ 和 $\boldsymbol{a}_3$ 方向上的元胞数目. 于是平移群 T_{G_b}分解为三个子群的直积，即

$$T_{G_b}=T_{G_{m_1}}\otimes T_{G_{m_2}}\otimes T_{G_{m_3}} \tag{6.1.4}$$

每个子群为 N_i 阶的循环群

$$T_{G_{m_i}}=\{\{e|\boldsymbol{a}_i\}^{n_i}\},\quad n_i=0,1,2,\cdots,N_i \tag{6.1.5}$$

因而它有 N_i 个一维不可约表示，第 p_i 个不可约表示为

$$\hat{T}^P_{G_{m_i}}(\{e|\boldsymbol{a}_i\})=\lambda_{p_i} \tag{6.1.6}$$

它满足方程

$$\hat{T}^P_{G_{m_i}}(\{e|\boldsymbol{a}_i\}^{N_i})=\lambda_{p_i}^{N_i}=T^P_{G_{m_i}}(\{e|\boldsymbol{0}\}) \tag{6.1.7}$$

因而

$$\lambda_{p_i}=\exp\left\{-\mathrm{i}\frac{2\pi p_i}{N_i}\right\},\quad p_i=0,1,2,\cdots,N_i-1 \tag{6.1.8}$$

令

$$k_i=\frac{p_i}{N_i} \tag{6.1.9}$$

则

$$\lambda_{p_i}=\exp\{-\mathrm{i}2\pi k_i\},\quad k_i=\frac{p_i}{N_i}=0,\ \frac{1}{N_i},\ \frac{2}{N_i},\ \cdots,\ \frac{N_i-1}{N_i}\tag{6.1.10}$$

由(6.1.6)和(6.1.8)式得到平移群的不可约表示为

$$\hat{T}^{P}_{G_b}(\{e|\boldsymbol{R}_n\})=\exp\{-\mathrm{i}2\pi(k_1n_1+k_2n_2+k_3n_3)\}\tag{6.1.11}$$

标记不可约表示的 $\boldsymbol{P}$ 为

$$\boldsymbol{P}=(P_1,\ P_2,\ P_3)=(N_1k_1,\ N_2k_2,\ N_3k_3)\tag{6.1.12}$$

以后直接用向量 $\boldsymbol{k}$ 标记上述不可约表示，即

$$\hat{T}^{\boldsymbol{k}}_{G_b}(\{e|\boldsymbol{R}_n\})=\exp\{-2\pi\mathrm{i}(k_1n_1+k_2n_2+k_3n_3)\}\tag{6.1.11'}$$

向量 $\boldsymbol{k}=(k_1,\ k_2,\ k_3)$ 有重要的意义. 为了得到它的基矢，由空间基矢 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ 定义倒易基矢 $\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，$\boldsymbol{b}_3$，它们为

$$\begin{cases}\boldsymbol{b}_1=2\pi\dfrac{\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)}\\[2ex]\boldsymbol{b}_2=2\pi\dfrac{\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)}\\[2ex]\boldsymbol{b}_3=2\pi\dfrac{\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)}\end{cases}\tag{6.1.13}$$

显然

$$\boldsymbol{a}_i\cdot\boldsymbol{b}_j=2\pi\delta_{ij},\quad i,j=1,\ 2,\ 3\tag{6.1.14}$$

令向量

$$\boldsymbol{k}=k_1\boldsymbol{b}_1+k_2\boldsymbol{b}_2+k_3\boldsymbol{b}_3\tag{6.1.15}$$

于是不可约表示(6.1.11′)变为

$$\hat{T}^{\boldsymbol{k}}_{G}(\{e|\boldsymbol{R}_n\})=\exp\{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n\}\tag{6.1.16}$$

因为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n&=k_1n_1\boldsymbol{b}_1\cdot\boldsymbol{a}_1+k_2n_2\boldsymbol{b}_2\cdot\boldsymbol{a}_2+k_3n_3\boldsymbol{b}_3\cdot\boldsymbol{a}_3\\&=2\pi\frac{1}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)}\\&\quad\cdot[n_1k_1\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)+n_2k_2\boldsymbol{a}_2\cdot(\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1)+n_3k_3\boldsymbol{a}_3\cdot(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2)]\\&=2\pi(n_1k_1+n_2k_2+n_3k_3)\end{aligned}$$

即(6.1.16)式与(6.1.11′)相等.

按 $\boldsymbol{k}$ 向量的定义 $k_i=0,\ \frac{1}{N_i},\ \frac{2}{N_i},\ \cdots,\ \frac{N_i-1}{N_i}$，因而共有 $N_1N_2N_3$ 个 $\boldsymbol{k}$，它们标记了平移群 T_{G_b} 的 $N_1N_2N_3$ 个不等价不可约表示.

由 $\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，$\boldsymbol{b}_3$ 所张成的空间称为倒易空间(reciprocal space). 向量 $\boldsymbol{k}$ 称为波矢向量或倒易量. 以 $\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，$\boldsymbol{b}_3$ 为棱形成的平行六面体称为 $\boldsymbol{k}$-空间的元胞，元胞内有 $N_1N_2N_3$ 个 $\boldsymbol{k}$ 向量，$0\leqslant k_i<\frac{N_i-1}{N_i}$ ($\frac{N_i-1}{N_i}\to1$，当 N_i 很大时). 对于整个 $\boldsymbol{k}$-空间，称

$$k_m = m_1 b_1 + m_2 b_2 + m_3 b_3,\ m_i \text{ 为整数} \tag{6.1.17}$$

为倒易空间点阵(reciprocal lattice)的格点. 对于元胞外的向量k'可写为

$$k' = k + k_m \tag{6.1.18}$$

k为元胞内或元胞界面上的波矢向量. 容易看到k'所给出的不可约表示与k给出的不可约表示完全相同, 因为

$$\begin{aligned}\hat{T}_G^{k'}(\{\alpha \mid R_n\}) &= \exp\{-\mathrm{i}k' \cdot R_n\} \\ &= \exp\{-\mathrm{i}k \cdot R_n\} \cdot \exp\{-\mathrm{i}k_m \cdot R_n\} \\ &= \exp\{-\mathrm{i}k \cdot R_n\}\end{aligned} \tag{6.1.19}$$

定理 6.1.1(Bloch 定理)　平移群$T=\{e|R_n\}$是 Abel 群, 因而只有一维的不可约表示, 表示的基矢$\Psi_k(r)$具有如下性质:

$$\begin{cases}\Psi_k(r) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot r}U(r) \\ U(r) = U(r+R_n)\end{cases} \tag{6.1.20}$$

称这种函数为 Bloch 函数.

证明　用平移群算子$\hat{T}(\{e|R_n\})$作用于空间函数$\Psi(r)$, 得到

$$\hat{T}(\{e|R_n\})\Psi(r) = \Psi(\{e|R_n\}^{-1}r) = \Psi_k(r-R_n)$$

令$\Psi_k(r)$是平移群不可约表示k的基, 则

$$\hat{T}(\{e|R_n\})\Psi_k(r) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot R_n}\Psi_k(r)$$

按定义得到

$$\Psi_k(r-R_n) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot R_n}\Psi_k(r)$$

令$r' = r - R_n$, 则

$$\Psi_k(r') = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot R_n}\Psi_k(r'+R_n)$$

两边乘以$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot r'}$, 得到

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot r'}\Psi_k(r') = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(R_n+r')}\Psi_k(r'+R_n)$$

这表明函数$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot r}\Psi_k(r)$具有$R_n$的对称性, 因而令

$$U(r) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot r}\Psi_k(r)$$

则不可约表示基函数$\Psi_k(r)$为

$$\Psi_k(r) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot r}U(r),\quad U(r) = U(r+R_n)$$

这就证明了 Bloch 定理.

Bloch 定理在晶体理论中有着重要的作用. 因为晶体具有平移对称性, 晶体 Hamiltion 算子H与平移群交换, 因而晶体中单电子波函数一定是 Bloch 函数.

以k为标志的全部 Bloch 函数$\{\Psi_k(r) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot r}U(r)\}$张成一个空间, 称为 Bloch 函数空间. 它们之间的不同在于$U(r)$不同, 但不同的$U(r)$都具有$U(r)=U(r+R_n)$性质.

6.1.2　倒易空间的倒易点阵与 Brillouin 区

14 种 Bravais 点阵由特定的基向量a_1, a_2, a_3决定, 而一种 Bravais 点阵的基向量a_1, a_2, a_3由公式(6.1.13)唯一地决定一种倒易空间的基向量, 由这组基向量又确定一种倒

易空间中的倒易点阵

$$\boldsymbol{k}_m = m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3, \quad m_1, m_2, m_3 \text{ 为整数}$$

因而倒易点阵也为与空间点阵相对应的有 14 种点阵.

在第五章中已讨论了点群 G 类的空间群 G^k 的格点矢量 $\boldsymbol{R}_n$ 具有点群 G 的对称性，即

$$\hat{\alpha}_i\boldsymbol{R}_n = \boldsymbol{R}_{n'}, \quad \hat{\alpha}_i \in G$$

下面证明倒易空间的格点矢量 $\boldsymbol{k}_m$ 也具有点群 G 的对称性，即

$$\hat{\alpha}_i\boldsymbol{k}_m = \boldsymbol{k}_{m'} \tag{6.1.21}$$

由(6.1.14)式得到

$$\boldsymbol{R}_n \cdot \boldsymbol{k}_m = \sum_{i=1}^{3} n_i m_i \boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_i = 2\pi P, \quad P = \sum_{i=1}^{3} n_i m_i$$

而且

$$\hat{\alpha}^{-1}\boldsymbol{R}_n \cdot \boldsymbol{k}_m = 2\pi P'$$

$\hat{\alpha}$ 为实正交矩阵，$\hat{\alpha}^{-1} = \tilde{\hat{\alpha}}$，因此

$$\hat{\alpha}^{-1}\boldsymbol{R}_n \cdot \boldsymbol{k}_m = \boldsymbol{R}_n \cdot \hat{\alpha}\boldsymbol{k}_m = 2\pi P' \tag{6.1.22}$$

这表明 $\hat{\alpha}^{-1}\boldsymbol{k}_m$ 也是倒易空间的格点矢量，这就证明了倒易点阵也具有点群 G 的对称性.

倒易空间点阵的元胞，通常是取倒易空间中的一个格点为原点，把这个原点与它最邻近的格点连线，然后做这些连线的中点的垂直平面，这些中垂面相交所分割出的倒易点阵中的一个封闭的体积就是倒易空间的元胞，这个元胞也称为第一 Brillouin 区. 然后如果再取原点与次邻近格点的连线，并做垂直平分面，则又得到封闭体积，称第二 Brillouin 区. 如此，等等，可得到一系列 Brillouin 区. 由前述可知第一 Brillouin 区的向量 $\boldsymbol{k}$ 能给出平移群的全部不等价不可约表示.

Brillouin 区对讨论空间群的表示理论是十分重要的，下面以立方系为例，具体讨论三种第一 Brillouin 区.

具有 O_h 对称性的立方系的 Bravais 点阵有三种类型：

简单型(P)，它的基向量为

$$\boldsymbol{a}_1 = a(1, 0, 0)$$
$$\boldsymbol{a}_2 = a(0, 1, 0)$$
$$\boldsymbol{a}_3 = a(0, 0, 1)$$

面心型(F)，它的基向量为

$$\boldsymbol{a}_1' = \frac{a}{2}(0, 1, 1)$$
$$\boldsymbol{a}_2' = \frac{a}{2}(1, 0, 1)$$
$$\boldsymbol{a}_3' = \frac{a}{2}(1, 1, 0)$$

体心型(I)，它的基向量为

$$\boldsymbol{a}_1'' = \frac{a}{2}(\bar{1}, 1, 1)$$

$$a_2'' = \frac{a}{2}(1, \bar{1}, 1)$$

$$a_3'' = \frac{a}{2}(1, 1, \bar{1})$$

它们所定义的倒易空间的基向量分别为

$$b_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0), \quad b_1' = \frac{2\pi}{a}(\bar{1}, 1, 1), \quad b_1'' = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 1)$$

$$b_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0), \quad b_2' = \frac{2\pi}{a}(1, \bar{1}, 1), \quad b_2'' = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 1)$$

$$b_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 1), \quad b_3' = \frac{2\pi}{a}(1, 1, \bar{1}), \quad b_3'' = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 0)$$

由此可见简单立方型空间点阵所对应的倒易点阵也是简单立方型的点阵，它的第一Brillouin 区如图 6. 1. 1 所示，一边长为$\frac{2\pi}{a}$的立方体．而面心立方型空间点阵所对应的倒易点阵则为体心型的，图 6. 1. 2 给出了它的第一Brillouin区，为一截角八面体或称十四面体．体心型空间点阵对应的倒易点阵为面心型点阵，图 6. 1. 3 给出了它的第一 Brillouin 区．图中一些特殊点的意义将在后面讨论．

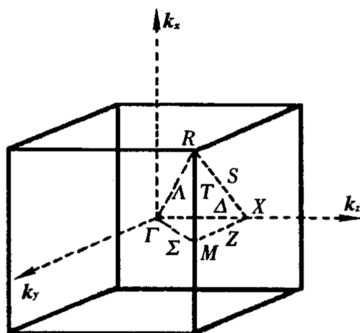


图 6. 1. 1　简单立方点阵的 Brillouin 区图

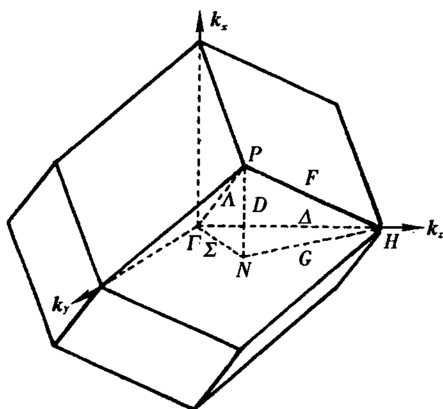


图 6. 1. 2　面心立方点阵的 Brillouin 区

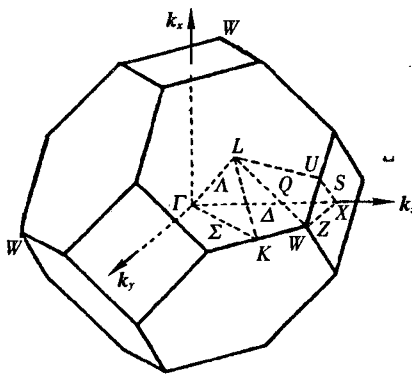


图 6. 1. 3　体心立方点阵的 Brillouin 区

6.2 共轭表示与空间群的子群——小群

6.2.1 共轭表示

群 H 是群 G 的不变子群，群 H 的一个表示 $H^{(\nu)}$，它的表示矩阵为 $\hat{H}^{(\nu)}(h)$，$h \in H$. 可由群 G 的元素 $g \in G$，定义群 H 的表示 $\hat{H}^{(\nu)}$ 的共轭表示 $\hat{H}_g^{(\nu)}$，$\hat{H}_g^{(\nu)}$ 的表示矩阵为：

$$\hat{H}_g^{(\nu)}(h) = \hat{H}^{(\nu)}(g^{-1} \cdot hg) \tag{6.2.1}$$

由于 H 是 G 的不变子群，因而 $h \in H$，则 $g^{-1}h \cdot g \in H(g \in G)$. 因而(6.2.1)式成立，即 $g^{-1}h \cdot g = h' \in H$，此外

$$\begin{aligned}\hat{H}_g^{(\nu)}(h) \cdot \hat{H}_g^{(\nu)}(h') &= \hat{H}^{(\nu)}(g^{-1} \cdot hg)\hat{H}^{(\nu)}(g^{-1} \cdot h' \cdot g) \\ &= \hat{H}^{(\nu)}(g^{-1} \cdot h \cdot g \cdot g^{-1} \cdot h' \cdot g) \\ &= \hat{H}^{(\nu)}(g^{-1} \cdot h \cdot h' \cdot g) \\ &= \hat{H}_g^{(\nu)}(h \cdot h')\end{aligned} \tag{6.2.2}$$

这就证明了 $\hat{H}_g^{(\nu)}$ 确是 H 群的一个表示. 如果 $g = h \in H$，则 $H_g^{(\nu)} = H_h^{(\nu)}$ 为 $H^{(\nu)}$ 的自共轭表示，显然自共轭表示 $H_h^{(\nu)}$ 与表示 $H^{(\nu)}$ 是等价表示，因为

$$\hat{H}_h^{(\nu)}(h^{-1} \cdot h' \cdot h) = \hat{H}^{(\nu)}(h)^{-1} \cdot \hat{H}^{(\nu)}(h') \cdot \hat{H}^{(\nu)}(h)$$

所以特征标

$$\chi_h^{(\nu)}(h') = \chi^{(\nu)}(h')$$

当 $g \in G$，而 g 不属于 H 时，H 群的表示 $\hat{H}^{(\nu)}$ 与它的共轭表示 $\hat{H}_g^{(\nu)}$ 有相同的维数. 如果 $\hat{H}^{(\nu)}$ 是群 H 的不可约表示，按不可约表示判据，即

$$\frac{1}{n_h}\sum_h |\chi^{(\nu)}(h)|^2 = 1 \tag{6.2.3}$$

n_h 为群 H 的阶. 显然共轭表示 $\hat{H}_g^{(\nu)}$ 也是不可约表示. 即

$$\frac{1}{n_h}\sum_h |\chi_g^{(\nu)}(h)|^2 = \frac{1}{n_h}\sum_h |\chi^{(\nu)}(g^{-1} \cdot h \cdot g)|^2 = 1$$

群 G 的不变子群 H 的不可约表示 $\hat{H}^{(\nu)}$ 的全部不等价的不可约共轭表示 $\hat{H}_g^{(\nu)}$ 称为群 G 的不变子群 H 的轨道，在一个轨道中共轭不等价不可约表示的数目称为轨道的阶. 显然阶数不能超过 H 群 m_ν 维不可约表示的数目，m_ν 为不可约表示 $\hat{H}^{(\nu)}$ 的维数.

群 G 的不可约表示 $\hat{G}^{(\mu)}$，若限定元素 g 只取子群 H 的元素 h 时，得到子群 H 的表示 $\hat{H}(\downarrow \hat{G}^{(\mu)})$，即第三章讨论的分导表示($\hat{G}^{(\mu)} \downarrow_H$)，$\hat{H}(\downarrow \hat{G}^{(\mu)})$ 对子群 H 一般是可约的，因而 $\hat{H}(\downarrow \hat{G}^{(\mu)})$ 可对子群 H 的不可约表示分解，即

$$\hat{H}(\downarrow \hat{G}^{(\mu)}) = \sum_\nu \oplus a_\nu \hat{H}^{(\nu)} \tag{6.2.4}$$

其中 $\hat{H}^{(\nu)}$ 是子群 H 的不可约表示. 对于这种分解存在如下定理.

定理 6.2.1　分导表示 $\hat{H}(\downarrow\hat{G}^{(\mu)})$ 对不可约表示 $\hat{H}^{(\nu)}$ 的约化(6.2.4)式，只能为

$$\hat{H}(\downarrow\hat{G}^{(\mu)}) = \sum_{g_i} \oplus a^{(\nu)} \hat{H}_{g_i}^{\nu(\mu)} \tag{6.2.5}$$

$\hat{H}_{g_i}^{(\nu)}$ 为与不可约表示 $\hat{H}^{(\nu)}$ 共轭的不等价的不可约表示，$\hat{H}_{g_i}^{(\nu)}(h) = \hat{H}^{\nu}(g_i^{-1}\cdot h\cdot g_i)$，$g_i\in G$.

这个定理包括两个内容：

(1) 分导表示 $\hat{H}(\downarrow\hat{G}^{(\mu)})$ 的不可约分解中，如果出现不可约表示 $\hat{H}^{(\nu)}$，则一定出现与它共轭的一切不等价不可约表示 $\hat{H}_{g_i}^{\nu}(h) = \hat{H}^{\nu}(g_i^{-1}\cdot h\cdot g_i)$，而且它们出现的重复度相同 $a^{(\nu)} = a_{g_i}^{(\nu)}$.

(2) 在这种不可约分解中只出现一种由不可约表示 $\hat{G}^{(\mu)}$ 决定的不可约表示 $\hat{H}^{\nu(\mu)}$，不可约表示 $H^{(\nu)}$ 完全由不可约表示 μ 决定，其它不可约表示 $\hat{H}^{(\nu')}(\nu'\neq\nu(\mu))$ 不能出现，或者说 $a^{(\nu')}=0$.

证明　(1) 由(1.10.12)式在分导表示 $\hat{H}(\downarrow\hat{G}^{(\mu)})$ 中不可约表示 $\hat{H}^{(\nu)}$ 出现的重复度 $a^{(\nu)}$ 为

$$a^{(\nu)} = (\chi_H^{(\mu)}, \chi^{(\nu)}) = \frac{1}{n_h}\sum_{h\in H}\chi_H^{(\mu)}(h)\chi^{(\nu)}(h)^*$$

其中 $\chi_H^{(\mu)}$ 为分导表示 $\hat{H}(\downarrow\hat{G}^{(\mu)})$ 的特征标，$\chi^{(\nu)}$ 为不可约表示 $H^{(\nu)}$ 的特征标. n_h 为子群 H 的阶，共轭表示 $H_{g_i}^{(\nu)}$ 的重复度为

$$a_{g_i}^{(\nu)} = (\chi_H^{(\mu)}, \chi_{g_i}^{(\nu)}) = \frac{1}{n_h}\sum_{h\in H}\chi_H^{(\mu)}(h)^*\cdot\chi^{(\nu)}(g_i^{-1}\cdot h\cdot g_i)$$

而对于群 G，$g_i^{-1}\cdot h\cdot g_i$ 与 h 互为共轭元素，属于一个共轭类，故为 $\chi_H^{(\mu)}(h) = \chi_H^{(\mu)}(g_i^{-1}\cdot h\cdot g_i)$，因而

$$a^{(\nu)} = a_{g_i}^{(\nu)}$$

这便证明了定理的第一部分.

(2) 如果在不可约分解中除(6.2.5)式中的不可约表示 $\hat{H}^{\nu(\mu)}$ 和与它共轭的不等价表示外，尚有其它不可约表示 $\hat{H}^{(\nu')}$ 出现. 由(1)中证明也必然还有一切与 $\hat{H}^{(\nu')}$ 共轭的不等价不可约表示 $\hat{H}_{g_i}^{(\nu')}$ 以相同重复度出现. 比如这种不可约表示只有一个 $\hat{H}^{(\nu')}$，则约化后的表示矩阵具有形式

$$U^{-1}\times\hat{H}(\downarrow\hat{G}^{(\mu)})(h)\cdot U = \begin{pmatrix}\hat{H}_1(h) & O\\ O & \hat{H}_2(h)\end{pmatrix} \tag{6.2.6}$$

$\hat{H}_1(h)$ 是不可约表 $\hat{H}^{(\nu)}(h)$ 及其共轭的不等价表示 $\hat{H}_{g_i}^{(\nu)}(h)$ 的直和，$\hat{H}_2(h)$ 是不可约表示 $\hat{H}^{(\nu')}(h)$ 及其共轭的不等价不可约表示 $\hat{H}_{g_i}^{(\nu')}(h)$ 的直和. 然而由于共轭表示间的关系

$$\begin{aligned}\hat{G}_{g_i}^{(\mu)}(h) &= \hat{G}^{(\mu)}(g_i^{-1}\cdot h\cdot g_i) = \hat{G}^{(\mu)}(g_i^{-1})\cdot\hat{G}^{(\mu)}(h)\cdot\hat{G}^{(\mu)}(g_i)\\ &= \hat{G}^{(\mu)}(g_i^{-1})\cdot\hat{H}(\downarrow\hat{G}^{(\mu)})(h)\cdot\hat{G}^{(\mu)}(g_i)\end{aligned}$$

因而约化后 $\hat{H}(\downarrow\hat{G}^{(\mu)})(h)$ 具有(6.2.6)式的形式，一定要求不可约表示矩阵 $\hat{G}^{(\mu)}(g)$ 也具有可变换为(6.2.6)式的形式，这样 $\hat{G}^{(\mu)}$ 就变成了可约表示，这与不可约表示的要求相矛盾，因而在不可约表示分解中不能出现 $\hat{H}^{(\nu')}$，这就证明了定理的第二部分.

当不可约表示 $\hat{H}^{(\nu)}$ 不存在不等价的共轭表示 $\hat{H}_{g_i}^{(\nu)}$ 时，(6.2.5)式变为

$$\hat{H}(\downarrow\hat{G}^{(\mu)})=\bigoplus a^{(\nu)}\hat{H}^{\nu(\mu)}$$

若 $\hat{G}^{(\mu)}$ 是 $n(\mu)$ 维的不可约表示，$\hat{H}^{(\nu)}$ 为 $m(\nu)$ 维不可约表示，则 $a^{(\nu)}=\dfrac{n(\mu)}{m(\nu)}$.

利用共轭表示理论可定义空间群的子群——小群.

6.2.2 空间群的子群——小群

空间群 G^P(为避免与波矢 $\boldsymbol{k}$ 混淆，标记空间群为 G^P，即第 G 类空间群中的第 p 个，在第五章中曾记为 G^k)的平移子群为 T_{G_b}，它的不可约表示 $\hat{T}_{G_b}^{(\boldsymbol{k})}$ 为

$$\hat{T}_{G_b}^{(\boldsymbol{k})}(\{e|\boldsymbol{R}_n\})=\exp\{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n\} \tag{6.2.7}$$

按共轭表示的定义，对于空间群元素 $g=\{\alpha|\boldsymbol{t}\}$ 的共轭表示为

$$\begin{aligned}\hat{T}_{G_b,g}^{(\boldsymbol{k})}&=\hat{T}_{G_b}^{(\boldsymbol{k})}(\{\alpha|\boldsymbol{t}\}^{-1}\cdot\{e|\boldsymbol{R}_n\}\cdot\{\alpha|\boldsymbol{t}\})=\hat{T}_{G_b}^{(\boldsymbol{k})}(\{e|\alpha^{-1}\boldsymbol{R}_n\})\\&=\exp\{-i\boldsymbol{k}\cdot\alpha^{-1}\boldsymbol{R}_n\}=\exp\{-i\alpha\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n\}\\&=\hat{T}_{G_b}^{(\alpha\boldsymbol{k})}\qquad(g=\{\alpha|\boldsymbol{t}\})\end{aligned} \tag{6.2.8}$$

在上式中利用了 $\boldsymbol{k}\cdot\alpha^{-1}\boldsymbol{R}_n=\alpha\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n$.

如果

$$\alpha\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m \tag{6.2.9}$$

则相互共轭的表示 $\hat{T}_{G_b}^{(\boldsymbol{k})}$ 与 $\hat{T}_{G_b}^{(\alpha\boldsymbol{k})}$ 是等价的，即

$$\begin{cases}\hat{T}_{G_b}^{(\boldsymbol{k})}(\{e|\boldsymbol{R}_n\})=\exp\{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n\}\\\hat{T}_{G_b}^{(\alpha\boldsymbol{k})}(\{e|\boldsymbol{R}_n\})=\exp\{-i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m)\cdot\boldsymbol{R}_n\}=\exp\{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n\}=\hat{T}_{G_b}^{(\boldsymbol{k})}\end{cases} \tag{6.2.10}$$

若取满足条件(6.2.9)的全部 α，由它们给出的空间群 G^P 的元素 $\{\{\alpha|\boldsymbol{t}\}|\alpha\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m\}$构成空间群 G^P 的一个子群，这个子群记为 $G_{\boldsymbol{k}}^P$，即

$$G_{\boldsymbol{k}}^P=\{\{\alpha|\boldsymbol{t}\},\ \alpha\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m\} \tag{6.2.11}$$

下面证明 $G_{\boldsymbol{k}}^P$确实是 G^P 的子群. 因为

$$\{\alpha|\boldsymbol{t}\}\cdot\{\alpha'|\boldsymbol{t}'\}=\{\alpha\cdot\alpha'|\alpha\boldsymbol{t}'+\boldsymbol{t}\}$$

由于

$$\alpha'\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_{m'},\quad\alpha\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m$$

因而

$$\alpha\cdot\alpha'\boldsymbol{k}=\alpha(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_{m'})=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m+\alpha\boldsymbol{k}_{m'}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_{m''}$$

因为倒易格点具有点群对称性，

$$\alpha k_{m'} = k_{m''},\ \alpha k_{m''} + k_m = k_{m'''}$$

并且

$$ek = k$$

满足(6.2.9)式，因而(6.2.11)中包括单位元$\{e|0\}$，而且若$\{\alpha|t\} \in G_k^P$，则

$$\{\alpha|t\}^{-1} = \{\alpha^{-1}|-t\}$$

也属于集合(6.2.11)，因为

$$\alpha k = k + k_m,\quad \alpha^{-1}\cdot\alpha k = \alpha^{-1}k + \alpha^{-1}k_m$$

因而

$$\alpha^{-1}k = \alpha^{-1}\cdot\alpha k - \alpha^{-1}k_m = k + k_{m'}$$

这就证明了G_k^P是一个群，当然是空间群G^P的子群. 这个子群的特征是

$$\alpha k = k + k_m$$

即(6.2.9)式，也就是说G_k^P的全部元素$\{\alpha|t\}$中所有$\alpha \in G$均满足(6.2.9)式. 称子群G_k^P为空间群G^P的小子群，也称波矢空间群. 容易看到小子群G_k^P包括了空间群G的全部平移子群$\{e|R_n\}$，因为$\alpha = e$时，满足(6.2.9)式，因而有群链

$$G^P \supset G_k^P \supset T_{G_b}$$

在上述证明G_k^P是G^P的子群的过程中，实际上也证明了点变换集合$\{\alpha\} = \{\alpha k = k + k_m\}$也是一个点群，记为$G(k)$，称为小点群或波矢群，它是空间群$G^P$的点群$G$的子群，即$G \supset G(k)$.

因而可定义小商群G_k^P/T_{G_b}它同构于波矢群$G(k)$.

空间群G^P的元素$\{\alpha|t\} \in G^P$的算子$\hat{P}(\{\alpha|t\})$作用于 Bloch 函数$\Psi_k(r) = e^{-ik\cdot r}U(r)$时为

$$\begin{aligned}\hat{P}(\{\alpha|t\})\Psi_k(r) &= \Psi_k(\alpha^{-1}r - t)\\ &= e^{-ik\cdot\alpha^{-1}r}e^{ik\cdot t}U(\alpha^{-1}r - t)\\ &= e^{-ik\cdot\alpha^{-1}r}U'(r)\end{aligned} \tag{6.2.12}$$

其中

$$U'(r) = e^{ik\cdot t}U(\alpha^{-1}r - t)$$

显然

$$\begin{aligned}U'(r + R_n) &= e^{ik\cdot t}U(\alpha^{-1}(r + R_n) - t)\\ &= e^{ik\cdot t}U(\alpha^{-1}r + \alpha^{-1}R_n - t) = U'(r)\end{aligned} \tag{6.2.13}$$

即$U'(r)$仍然是R_n的周期函数，这表明空间群算子$\hat{P}(\{\alpha|t\})$把 Bloch 函数$\Psi_k(r)$变为 Bloch 函数$\Psi_{\alpha k}(r)$.

从而证明空间群G^P的子群小群G_k^P作用于 Bloch 函数为

$$\hat{P}(\{\alpha|t\})\Psi_k(r) = \Psi_{\alpha k}(r) = \Psi'_k(r),\quad \alpha \in G(k) \tag{6.2.14}$$

即小群G_k^P作用于 Bloch 函数$\Psi_k(r)$，把它变为k相同的 Bloch 函数，因而小子群G_k^P又称为波矢空间群.

6.2.3 空间群 G^P 按小群左陪集的分解与波矢星

小群 G_k^P是空间 G^P 的子群，因而空间群 G^P 可分解为小群和小群的陪集的直和，即

$$G^P = \sum_i \oplus \{\alpha_i \mid t_i\} \cdot G_k^P \tag{6.2.15}$$

$\{\alpha_i|t_i\}$是不同陪集的代表元素. 容易看到陪集

$$\{\alpha_i \mid t_i + R_n\} \cdot G_k^P = \{\alpha_i \mid t_i\} \cdot \{e \mid \alpha_i^{-1}R_n\} \cdot G_k^P = \{\alpha_i \mid t_i\} \cdot G_k^P \tag{6.2.16}$$

因为$\{e|\alpha_i^{-1}R_n\} \in T_{G_b}$，$\{e|\alpha_i^{-1}R_n\} \cdot G_k^P = G_k^P$. 如果 $\alpha_i \in G(k)$，则$\{\alpha_i|t_i\} \cdot G_k^P = G_k^P$. 因而陪集分解(6.2.15)中的代表元素为 $\alpha_i \in G$，而不属于 $G(k)$，t_i 为最小的平移. 若$\{\alpha_i|0\} \in G^P$，则 $t_i = 0$；若$\{\alpha_i|0\}$不属于 G^P，而$\{\alpha_i|t_i\} \in G^P$，则 t_i 为非基本平移. 由于 $G(k)$是空间群点群 G 的子群，因而群 G 可按子群 $G(k)$的陪集分解，即

$$G = \sum_i \oplus \alpha_i \cdot G(k) \tag{6.2.17}$$

这个分解与(6.2.15)式是等价的，陪集代表元素 α_i 是相同的. 因而(6.2.15)和(6.2.17)式中陪集代表元素 α_i 或$\{\alpha_i|t_i\}$的数目 $n(s)$为

$$n(s) = n(G)/n(G(k)) \tag{6.2.18}$$

这里 $n(G)$和 $n(G(k))$分别为点群 G 和小点群 $G(k)$的阶，在 $n(s)$个代表元素 α_i 中取 $\alpha_1 = e$.

对于 $n(s)$个点群元素构成的集合$\{\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_{n(s)}\}$，记为 $S(k)$. 把它们作用于波矢向量 k，得到

$$\alpha_1 k = ek = k, \quad \alpha_2 k = k_2, \cdots, \alpha_{n(s)} k = k_{n(s)}$$

这 $n(s)$个波矢向量都是互不相等，而且都是不等价的，即

$$\alpha_i k \neq k + k_m \tag{6.2.19}$$

(如果 $\alpha_i k = k + k_m$，称 $\alpha_i k$ 与 k 等价.)因为如果 $\alpha_i k$ 与 $\alpha_j k$ 等价(α_i，$\alpha_j \in S(k)$，但 $i \neq j$)，即

$$\alpha_i k = \alpha_j k + k_m \tag{6.2.20}$$

于是

$$\alpha_j^{-1} \cdot \alpha_i k = k + k_m$$

这表明 $\alpha_j^{-1} \cdot \alpha_i \in G(k)$，从而与 α_i，α_j 都是陪集分解(6.2.17)中的代表元素的假定相矛盾，因而(6.2.19)式是不可能成立的.

$n(s)$个不等价的波矢向量的集合称为波矢 k 的星，记为$\{k^*\}$，它们为

$$\{k^*\} = \{k, \alpha_2 k, \alpha_3 k, \cdots, \alpha_{n(s)} k | \alpha_i \in S(k)\} \tag{6.2.21}$$

波矢 k 的星$\{k^*\}$有两个重要性质：

(1) 波矢 k 的星$\{k^*\}$对于波矢点群 $G(k)$是不变的. 因为取 $\alpha_a \in G(k)$，$\alpha_j \in S(k)$，则 $\alpha_a \cdot \alpha_j$ 一定是陪集分解为(6.2.17)式中某一陪集 $\alpha_i \cdot G(k)$中的一个，令其为 $\alpha_a \cdot \alpha_j = \alpha_i \cdot \alpha_b$($\alpha_b \in G(k)$，$\alpha_i \in S(k)$). 于是

$$\begin{aligned} \alpha_a k_j &= \alpha_a \cdot \alpha_j k = \alpha_i \cdot \alpha_b k = \alpha_i (k + k_m) \\ &= \alpha_i k + k_{m'} \sim \alpha_i k \end{aligned} \tag{6.2.22}$$

(2) 波矢 $\boldsymbol{k}$ 的星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 与波矢 $\boldsymbol{k}'$ 的星 $\{\boldsymbol{k}'^*\}$ 或者交集为 0(没有共同元素)或者完全重合 $\{\boldsymbol{k}^*\}=\{\boldsymbol{k}'^*\}$.

如果 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 与 $\{\boldsymbol{k}'^*\}$ 有一个元素相同，即

$$\alpha_i\boldsymbol{k}=\alpha_j\boldsymbol{k}'$$

则

$$\alpha_j^{-1}\cdot\alpha_i\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$$

而 $\alpha_j^{-1}\cdot\alpha_i\in S(\boldsymbol{k})$，令 $\alpha_j^{-1}\cdot\alpha_i=\alpha_k\in S(\boldsymbol{k})$，即

$$\alpha_k\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$$

于是

$$\begin{aligned}\{\boldsymbol{k}'^*\}&=\{e\boldsymbol{k}',\ \alpha_2\boldsymbol{k}',\ \cdots,\ \alpha_{n(s)}\boldsymbol{k}'\}\\&=\{e\cdot\alpha_1\boldsymbol{k},\ \alpha_2\cdot\alpha_2\boldsymbol{k},\ \cdots,\ \alpha_{n(s)}\cdot\alpha_i\boldsymbol{k}\}=\{\boldsymbol{k}^*\}\end{aligned}$$

$(\alpha_i,\ \alpha_j\in S(\boldsymbol{k}),\ \alpha_i\cdot\alpha_j\in S(\boldsymbol{k}))$，即 $\{\boldsymbol{k}^*\}=\{\boldsymbol{k}'^*\}$，否则则完全不相交.

波矢向量 $\boldsymbol{k}$ 的星在空间群表示理论中十分重要. 下面举一些波矢星的实例进行说明.

1. C_{4v} 对称性的二维 Brillouin 区的波矢 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 星

为了简单下面讨论具有 C_{4v} 对称性的二维 Brillouin 区的波矢 $\boldsymbol{k}$ 的星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$. 在图6.2.1 中画出这种第一 Brillouin 区，它的边长为 $\frac{2\pi}{a}$. 点群 C_{4v} 的元素为 $\{e,\ c_4,\ c_4^2,\ c_4^3,\ 2\sigma_v,\ 2\sigma_d\}$，$c_4$ 的轴垂直图形并通过原点 Γ，两个 σ_d 垂直图形并分别包括 k_x 和 k_y 轴，两个 σ_v 垂直图形并分别包括两个对角线，4 个反射面相交于 c_4 轴. 坐标基矢为 $\boldsymbol{k}_x=\frac{\pi}{a}\boldsymbol{i}_x$，$\boldsymbol{k}_y=\frac{\pi}{a}\boldsymbol{i}_y$.

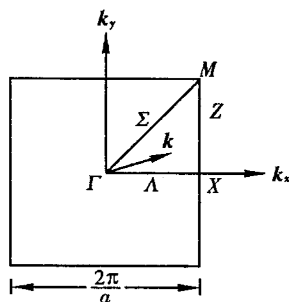


图 6.2.1　C_{4v} 对称性二维 Brillouin 区

第一 Brillouin 区中的 $\boldsymbol{k}$ 可分为对称点、对称线，三维情况下还有对称面. 比如对称点为 Γ、M、X，Γ(原点)具有 C_{4v} 的对称性，即

$$\alpha\cdot\Gamma=\Gamma\quad(\text{或}\ \alpha\mathbf{0}=\mathbf{0}),\quad\alpha\in C_{4v}$$

因而 Γ 点 $(0,\ 0)$ 的小点群 $G(0,\ 0)=C_{4v}$，$\boldsymbol{k}=\mathbf{0}$，它的星 $\{\Gamma^*\}=\{(0,\ 0)\}$. M 点也具有 C_{4v} 的对称性，即

$$c_4(1,\ 1)=(\bar{1},\ 1)=(1,\ 1)-2\boldsymbol{k}_x$$

$$c_4^2(1,\ 1)=(\bar{1},\ \bar{1})=(1,\ 1)-2\boldsymbol{k}_x-2\boldsymbol{k}_y$$

$$c_4^3(1,\ 1)=(1,\ \bar{1})=(1,\ 1)-2\boldsymbol{k}_y$$

$$c_d^{(1)}(1,\ 1)=(1,\ \bar{1})=(1,\ 1)-2\boldsymbol{k}_y$$

$$c_d^{(2)}(1,\ 1)=(\bar{1},\ 1)=(1,\ 1)-2\boldsymbol{k}_x$$

$$\sigma_v^{(1)}(1,\ 1)=(1,\ 1)$$

$$\sigma_v^{(2)}(1,\ 1)=(\bar{1},\ \bar{1})=(1,\ 1)-2\boldsymbol{k}_x-2\boldsymbol{k}_y$$

因而(1, 1)的小点群 $G(1, 1)=C_{4v}$，它的星也是一阶的，即

$$\{\boldsymbol{k}^{*}=\frac{\pi}{a}(1, 1)^{*}\}=\{\boldsymbol{k}=\frac{\pi}{a}(1, 1)\}$$

X 点的 $\boldsymbol{k}=(1, 0)$，显然具有 $C_{2v}=\{e, C_2, \sigma_d^{(1)}, \sigma_d^{(2)}\}$ 的对称性.

$$C_{4v}=C_4\otimes C_{2v}\cdot C_{2v}$$

因而 $\boldsymbol{k}=(1, 0)$ 的星为

$$\{\frac{2\pi}{a}(1, 0)^{*}\}=\{\frac{2\pi}{a}(1, 0), c_4\frac{2\pi}{a}(1, 0)=\frac{2\pi}{a}(0, 1)\}$$

阶为2.

对称线 Δ 为波矢 $\boldsymbol{k}=(x, 0)$，$0<x<1$，且有 $C_s=\{e, \sigma_d^{(2)}\}$ 的对称性，它的星为

$$\{\Delta^{*}\}=\{\boldsymbol{k}=(x, 0), c_4\boldsymbol{k}=(0, y), c_4^2\boldsymbol{k}=(-x, 0), c_4^3\boldsymbol{k}=(0, -y)\}\quad(0<x=y<1)$$

阶为4.

Brillouin 区中的波矢 $\boldsymbol{k}=(x, y)$ $(x=y)$ 构成另一种对称线 Σ，它的对称群为 $C_s=\{e, \sigma_v^{(1)}\}$ 构成的波矢星为

$$\{\Sigma^{*}\}=\{\boldsymbol{k}=(x, y); c_4\boldsymbol{k}=(-x, y); c_4^2\boldsymbol{k}=(-x, -y); c_4^3\boldsymbol{k}=(x, -y)\}\quad(x=y)$$

阶也是4.

波矢 $\boldsymbol{k}=(1, y)(0<y<1)$ 也是一个对称线 Z，它的对称群为 $C_s=\{e, \sigma_d^{(1)}\}$，它的星

$$\{Z^{*}\}=\{\boldsymbol{k}=(1, y), \sigma_v^{(1)}\boldsymbol{k}=(y, 1), c_4^2\boldsymbol{k}=(\bar{1}, \bar{y}), \sigma_v^{(2)}\boldsymbol{k}=(\bar{y}, \bar{1})\}$$

也是4阶的.

Brillouin 区中任意点 $\boldsymbol{k}$ 的对称群是 C_{4v} 的平庸子群 $\{e\}$，因而它的星是8阶的，即

$$\{\boldsymbol{k}^{*}\}=\{\boldsymbol{k}, c_4\boldsymbol{k}, c_4^2\boldsymbol{k}, c_4^3\boldsymbol{k}, \sigma_d^{(1)}\boldsymbol{k}, \sigma_d^{(2)}\boldsymbol{k}, \sigma_v^{(1)}\boldsymbol{k}, \sigma_v^{(2)}\boldsymbol{k}\}$$

在上述坐标中均应乘以 $\frac{1}{a}$，为了简单没写出. 在图 6.2.2 中给出了除了 Γ 点外的六种 $\boldsymbol{k}$ 星的图形.

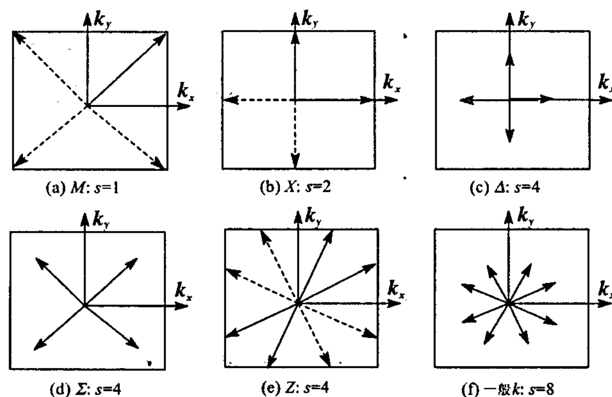


图 6.2.2　C_{4v} 对称性二维 Brillouin 区的 $\boldsymbol{k}$ 星图

2. 简单立方 Brillouin 区的 k 星

在图 6.1.1 中给出了简单立方对称性的 Brillouin 区，它的对称点群为 O_h，坐标系为 $\boldsymbol{k}_x=\frac{\pi}{a}\boldsymbol{i}_x$，$\boldsymbol{k}_y=\frac{\pi}{a}\boldsymbol{i}_y$，$\boldsymbol{k}_z=\frac{\pi}{a}\boldsymbol{i}_z$. 图中标出了一些特殊点和线，即

Γ: (0, 0, 0), X: (0, 0, 1), M: (0, 1, 1), Δ: (0, 0, η), Σ: (0, η, η)

Λ: (η, η, η), S: (η, η, 1), Z: (0, η, 1), T: (η, 1, 1), R: (1, 1, 1)

其中 $0<\eta<1$，此外还有对称面，如 ΓMX 面($k_*=0$)，ΓRM 面($k_y=k_z>k_x$)，ΓRX($k_x=k_y<k_z$)，MRX 面($k_z=\frac{n}{c}$)，在下表中给出了这些对称点(或线)的点群 $G(\boldsymbol{k})$ 相应星的阶：

$\boldsymbol{k}$	$G(\boldsymbol{k})$	$\boldsymbol{k}^*$ 的阶	$\boldsymbol{k}$	$G(\boldsymbol{k})$	$\boldsymbol{k}^*$ 的阶
(0, 0, 0)	O_h	1	(η, η, η)	C_{3v}	8
(0, 0, 1)	D_{4h}	3	(1, η, η)	C_{2v}	12
(0, 1, 1)	D_{4h}	3	(0, η, 1)	C_{2v}	12
(0, 0, η)	C_{4v}	6	(η, 1, 1)	C_{4v}	6
(0, η, η)	C_{2v}	12	(1, 1, 1)	O_h	1
ΓMX 面	C_s	2	ΓRX 面	C_s	2
ΓRM 面	C_s	2	MRX 面	C_s	2

下面给出各种特殊点的 k^*.

$$\{\Gamma^*\}=\{\Gamma(0,0,0)\}$$
$$\{R^*\}=\{R(1,1,1)\}$$
$$\{X^*\}=\{(0,0,1),(0,1,0),(1,0,0)\}$$
$$\{M^*\}=\{(0,1,1),(1,0,1),(1,1,0)\}$$
$$\{\Delta^*\}=\{(0,\pm\eta,0),(0,0,\pm\eta),(\pm\eta,0,0)\}$$
$$\{\Sigma^*\}=\{(\pm\eta,\pm\eta,0),(\pm\eta,0,\pm\eta),(0,\pm\eta,\pm\eta)\}$$
$$\{\Lambda^*\}=\{(\pm\eta,\pm\eta,\pm\eta)\}$$
$$\{S^*\}=\{(\pm\eta,1,\pm\eta),(1,\pm\eta,\pm\eta),(\pm\eta,\pm\eta,1)\}$$
$$\{Z^*\}=\{(1,0,\pm\eta),(0,1,\pm\eta),(\pm\eta,1,0),(1,\pm\eta,0),(\pm\eta,0,1),(0,\pm\eta,1)\}$$
$$\{T^*\}=\{(\pm\eta,1,1),(1,\pm\eta,1),(1,1,\pm\eta)\}$$

对于 Brillouin 空间中的任意矢量 $\boldsymbol{k}$，它只有 C_1 的对称性，因而它的星 $\{k^*\}$ 为 48 个矢量 $\boldsymbol{k}_i=\alpha_i\boldsymbol{k}$，$\alpha_i\in O_h$.

通过上述讨论可以看到，Brillouin 区中一般的点 $\boldsymbol{k}$，只有对点群单位元 e，才保持 $e\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}$，因而所对应的小子群 $G_k^P=T_G$，即小子群 G_k^P 就是空间群 G^P 的平移群，而对 Brillouin 区中的原点 Γ 和 Brillouin 区顶点 R 处的 $\boldsymbol{k}$，小子群 G_k^P 即为空间群本身，$G_k^P=G^P$.

6.3 小表示与允许小表示

称空间群 G^P 的子群——小群 G_k^P 的不可约表示 $G_k^{P(\nu)}$ 为小表示. 空间群 G^P 的平移子群 T_{G_b} 是小群 G_k^P 的不变子群, 因而可由平移子群 T_{G_b} 的不可约表示 $\hat{T}_{G_b}^{(k)}$ 诱导出小群 G_k^P 的诱导表示, 记为 $\hat{G}_k^P(\uparrow \hat{T}_{G_b}^{(k)})$. 这个表示一般是可约的, 可把它约化为 G^P 群不可约表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 的直和, 即

$$\hat{G}_k^P(\uparrow \hat{T}_{G_b}^{(k)}) = \sum_{\nu} \oplus a_\nu^k \hat{G}_k^{P(\nu)} \tag{6.3.1}$$

称在这种分解中出现的小群的不可约表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ ($a_\nu^k \neq 0$) 为允许小表示. 允许小表示在空间群不可约表示理论中十分重要, 下面讨论关于允许小表示的两个重要定理.

定理 6.3.1 关于允许小表示的充要条件的定理: 小表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 是允许小表示的充要条件是它对平移子群 T_{G_b} 的分导表示 $\hat{T}_{G_b}(\downarrow G_k^{P(\nu)})$ 具有如下形式:

$$\hat{T}_{G_b}(\downarrow G_k^{P(\nu)}) = \hat{I} \otimes \hat{T}_{G_b}^{(k)} = \hat{T}_{G_b}^{(k)} \oplus \hat{T}_{G_b}^{(k)} \oplus \cdots \oplus T_{G_b}^{(k)} \tag{6.3.2}$$

其中 $\hat{I}$ 是 $n_\nu(k)$ 维的单位矩阵, $n_\nu(k)$ 为小表示 $G_k^{P(\nu)}$ 的维数.

证明 充分性. 小群 G_k^P 的不可约表示 $G_k^{P(\nu)}$ 到平移子群 T_{G_b} 的分导表示 $\hat{T}_G(\downarrow G_k^{P(\nu)})$ 按平移群 T_{G_b} 的不可约表示分解为

$$\hat{T}_G(\downarrow G_k^{P(\nu)}) = \sum_k \oplus a_k^{(\nu)} \hat{T}_{G_b}^{(k)} = a_k^{(\nu)} \hat{T}_{G_b}^{(k)} \tag{6.3.3}$$

另一方面由平移群不可约表示 $\hat{T}_G^{(k)}$ 诱导出的小群表示 $G_k^P(\uparrow \hat{T}_G^{(k)})$ 向允许小表示 $G_k^{P(\nu)}$ 的分解为

$$G_k^P(\uparrow \hat{T}_G^{(k)}) = \sum_\nu \oplus b_\nu^{(k)} G_k^{P(\nu)} \tag{6.3.4}$$

由诱导表示的互易定理(3.2.2)可知(6.3.3)和(6.3.4)中的重复度 $a_k^{(\nu)} = b_\nu^{(k)}$. 这说明若在小表示 $G_k^{P(\nu)}$ 的分导表示 $\hat{T}_G(\downarrow G_k^{P(\nu)})$ 中出现平移群的不可约表示 $\hat{T}_G^k$, 则在 $\hat{T}_G^k$ 的诱导表示 $G_k^P(\uparrow \hat{T}_G^k)$ 中也一定出现不可约表示 $G_k^{P(\nu)}$, 而且重复度相同. 这就证明了满足(6.3.2)式的分导表示中的小表示 $G_k^{P(\nu)}$ 是允许小表示(即在诱导表示 $G_k^P(\uparrow \hat{T}_G^k)$ 的约化中出现的不可约表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$). 这就是(6.3.2)式为 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 是允许小表示的充分条件(满足(6.3.2)的小表示是允许小表示).

必要性. 如果小表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 是允许小表示, 定理 6.2.1 说明由 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 产生的分导表示 $\hat{T}_G(\downarrow \hat{G}_k^{P(\nu)})$ 的不可约分解中只能出现一种由 ν 决定的平移子群 T_G 的不可约表示及与它共轭的不等价表示, 由于不可约表示 $\hat{T}_G^k$ 不存在共轭的不等价不可约表示, 因而不可约表示分解只能为

$$\hat{T}_G(\downarrow \hat{G}_k^{P(\nu)}) = a_k^{(\nu)} \hat{T}_G^{(k)}$$

由定理 6.2.1 得到 $a_k^{(\nu)} = n_\nu(k)$ (不可约表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 的维数, 不可约表示 $\hat{T}_G^k$ 是一维表示).

因而

$$\hat{T}_G(\downarrow \hat{G}_k^{P(\nu)}) = \hat{I}\otimes\hat{T}_G^k$$

即(6.3.2)式，从而证明了定理的必要性.

由这个定理得到一个重要推论：

推论 允许小表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$在对平移子群的分导表示的不可约表示分解

$$\hat{T}_G(\downarrow \hat{G}_k^{P(\nu)}) = \underbrace{\hat{T}_{G_b}^{(k)}\oplus\hat{T}_{G_b}^{(k)}\oplus\cdots\oplus\hat{T}_{G_b}^{(k)}}_{n_\nu(k)}$$

中，不可约表示 $\hat{T}_G^{(k)}$ 出现的重复度为允许小表示的维数 $n_\nu(\boldsymbol{k})$.

定理 6.3.2 全部允许小表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$维数的平方和等于小商群 G_k^P/T_G 的维数，即

$$\sum_\nu n_\nu(\boldsymbol{k})^2 = \frac{n(G_k^P)}{n(T_{G_b})} \tag{6.3.5}$$

$n(G_k^P)$和$n(T_{G_b})$分别为小群 G_k^P 和平移群 T_{G_b}的维数.

证明 定理6.3.1的证明过程中已得到诱导表示的不可约分解

$$\hat{G}_k^P(\uparrow \hat{T}_G^k) = \sum_\nu b_\nu^{(k)}\hat{G}_k^{P(\nu)}$$

其中 $b_\nu^{(k)} = a_k^{(\nu)}$，$n_\nu(\boldsymbol{k})$为不可约表示 $G_k^{P(\nu)}$的维数，因而

$$\hat{G}_k^P(\uparrow \hat{T}_G^k) = \sum_\nu \oplus n_\nu(\boldsymbol{k})G_k^{P(\nu)} \tag{6.3.6}$$

而

$$\hat{T}_{G_b}(\downarrow \hat{G}_k^{P(\nu)}) = n_\nu(\boldsymbol{k})\hat{T}_{G_b}^k \tag{6.3.7}$$

因而由(6.3.6)式得出分导表示 $\hat{T}_{G_b}(\downarrow \hat{G}_k^P(\uparrow \hat{T}_G^k))$为

$$\hat{T}_{G_b}(\downarrow \hat{G}_k^P(\uparrow \hat{T}_G^k)) = \sum_\nu \oplus n_\nu(\boldsymbol{k})\hat{T}_{G_b}(\downarrow \hat{G}_k^{P(\nu)})$$

把(6.3.7)式代入上式为

$$\hat{T}_{G_b}(\downarrow \hat{G}_k^P(\uparrow \hat{T}_G^k)) = \sum_\nu \oplus n_\nu(\boldsymbol{k})^2\hat{T}_{G_b}^k \tag{6.3.8}$$

为了进一步证明上述命题，下面不证明地介绍一个一般性结论：对于任何群 G 和子群 T $(G\supset T)$，由群 T 的不可约表示 $\hat{T}^{(\nu)}$诱导的群 G 的表示$\hat{G}(\uparrow \hat{T}^{(\nu)})$，它对子群 T 的分导表示 $\hat{T}(\downarrow \hat{G}(\uparrow \hat{T}^{(\nu)}))$，按诱导表示的定义，由基础表示给出诱导表示 $\hat{G}(\uparrow \hat{T}^{(\nu)})$，然后限定于元素 $t\in T$(当然 $t\in G$)，得到的分导表示一定是不可约表示 $\hat{T}^{(\nu)}$的直和，而且具体可计算出

$$\hat{T}(\downarrow \hat{G}(\uparrow \hat{T}^{(\nu)})) = I\otimes\hat{T}^{(\nu)},\quad |\hat{I}| = \frac{n(G)}{n(T)}$$

$n(G)$和$n(T)$分别为群 G 和子群 T 的维数，这一结果是诱导表示和分导表示间的普遍关系.

利用这一结果可得到

$$\hat{T}_{G_b}(\downarrow \hat{G}_k^P(\uparrow \hat{T}_G^k)) = \frac{n(G_k^P)}{n(T_{G_b})}\hat{T}_{G_b}^{(k)} \tag{6.3.9}$$

比较(6.3.8)和(6.3.9)式得到

$$\sum_{\nu} n_{\nu}(k)^2 = \frac{n(G_k^P)}{n(T_G)}$$

这就证明了这个定理.

上述两个定理描述了允许小表示的主要性质. 定理6.3.1给出了允许小表示的判别条件, 定理6.3.2说明了全部允许小表示的总维数, 因而可用来判断是否找到了所有的允许小表示. 这些在寻求空间群不可约表示中是很重要的.

6.4 空间群的不可约表示

第五章已给出空间群 G^P 可按平移子群 T_{G_b} 的陪集分解, 即

$$\begin{aligned} G^P &= \sum_{\alpha} \oplus \{\alpha \mid t\} T_{G_b} \\ &= \sum_{\alpha \in \bar{G}} \oplus \{\alpha \mid \mathbf{0}\} T_{G_b} + \sum_{\alpha_i \in (G-\bar{G})} \oplus \{\alpha_i \mid t_i\} T_{G_b} \end{aligned} \tag{6.4.1}$$

$\bar{G}$ 为点子群($\bar{G} \subset G$), 而小子群为

$$G_k^P = \sum_{\alpha \in G(k)} \{\alpha \mid t\} T_{G_b} \tag{6.4.2}$$

$G(\boldsymbol{k})$ 为小点群, $G(\boldsymbol{k}) \subset G$, $\alpha \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_m$, $\alpha \in G(\boldsymbol{k})$. 因而空间群 G^P 按小子群陪集分解为

$$G^P = \sum_{\alpha_i \in S(k)} \oplus \{\alpha_i \mid t_i\} G_k^P \tag{6.4.3}$$

其中点变换集合 $S(\boldsymbol{k}) = \{e, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_{n_s}\}$ 给出波矢 $\boldsymbol{k}$ 的星

$$\{\boldsymbol{k}^*\} = \{\boldsymbol{k}, \alpha_2 \boldsymbol{k}, \alpha_3 \boldsymbol{k}, \cdots, \alpha_{n_s} \boldsymbol{k}\}$$

集合 $S(\boldsymbol{k})$ 中点变换的数目为 $n(G^P)/n(G_k^P)$.

上节已讨论了允许小表示的一些重要性质, 实际上空间群 G^P 的全部不等价不可约表示都可由允许小表示诱导而得到. 下面将证明, 由允许小表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 诱导出的空间群 G^P 的诱导表示

$$\hat{G}^{P(k,\nu)} = \hat{G}^P(\uparrow \hat{G}_k^{P(\nu)})$$

是不可约表示, 而且由所有允许小表示可诱导出空间群的全部不等价不可约表示.

6.4.1 由允许小表示诱导出的空间群的诱导表示

如果空间群 G^P 以 $\boldsymbol{k}$ 为特征的小子群 G_k^P 存在一个 $n_\nu(\boldsymbol{k})$ 维的不可约允许小表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$, 它的基矢为 $n_\nu(\boldsymbol{k})$ 个 Bloch 函数 $\Psi_k^{(i)}(\boldsymbol{r})$, $i = 1, 2, \cdots, n_\nu(\boldsymbol{k})$. 这些基函数张成一个函数空间, 记为 Λ^k.

$$\Lambda^k = \{\Psi_k^{(i)}(\boldsymbol{r}), \quad i = 1, 2, \cdots, n_\nu(\boldsymbol{k})\} \tag{6.4.4}$$

这些 Bloch 函数的特点是存在因子 $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$. 因而小子群算子为 $\hat{P}(\{\alpha \mid \boldsymbol{t}\})$, $\alpha \in G(\boldsymbol{k})$, $G(\boldsymbol{k})$ 为小子群 G_k^P 的小点群,

$$\alpha k = k + k_m$$

于是 $\hat{P}(\{\alpha|t\})$ 作用于 $\Psi_k^{(i)}(r)$ 为

$$\begin{aligned}\hat{P}(\{\alpha\mid t\})\Psi_k^{(i)}(r) &= \Psi_k^{(i)}(\alpha^{-1}r - t) \\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(\alpha^{-1}r-t)}U_k^{(i)}(\alpha^{-1}r - t) \\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha k\cdot r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_m\cdot r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kt)}U_k^{(i)}(\alpha^{-1}r - t) \\ &= \sum_j D_k^{(\nu)}(\{\alpha\mid t\})_{ji}\Psi_k^{(i)}(r)\end{aligned} \tag{6.4.5}$$

其中 $D_k^{P(\nu)}(\{\alpha|t\})$ 为小子群 G_k^P 的不可约表示 ν 的表示矩阵.

为了得到允许小表示的诱导表示，首先须求出空间群 G^P 对于子群小群 G_k^P 的基础表示. 在第三章第二节已讨论了基础表示就是以(6.4.3)式中空间群的陪集

$$\Sigma_1 = G_k^P,\ \Sigma_2 = \{\alpha_2|t_2\}G_k^P,\ \cdots,\ \Sigma_{n(s)} = \{\alpha_{n(s)}|t_{n(s)}\}G_k^P$$

为基矢构造的 G^P 的表示. 为了符号简单，以 $g_i = \{\alpha_i|t_i\}$ 表示第 i 个陪集的代表元素，以 $g^\beta \in G_k^P$ 代表小群中的元素，以 g 代表空间群 G^P 的元素，则

$$g\cdot\Sigma_i = g\cdot g_i\cdot G_k^P \tag{6.4.6}$$

(6.4.6)式有三种可能:

(1) 如 $g\cdot g_i = g_l$(g_l 为陪集代表元素)，则

$$g\cdot\Sigma_i = g\cdot g_i\cdot G_k^P = g_l\cdot G_k^P = \Sigma_l$$

(2) 如 $g\cdot g_i \in G_k^P$，则

$$g\cdot\Sigma_i = g\cdot g_i\cdot G_k^P = g_k^\beta\cdot G_k^P = G_k^P = \Sigma_1$$

(3) 如果 $g\cdot g_i$ 既不等于陪集代表元素 $g_1, g_2, \cdots, g_{n(s)}$，也不是小群 G_k^P 中的元素，它一定是某一陪集 Σ_j 中的元素，即

$$g\cdot g_i = g_j\cdot g^\beta \in \Sigma_j$$

因而

$$g\cdot\Sigma_i = \Sigma_j$$

概括以上三种情况可写为

$$g\cdot\Sigma_i = \Sigma_j,\quad \text{当}\ g\cdot g_i = g_j\cdot g^\beta\ \text{时}$$

由此得到 G^P 对于子群 G_k^P 的基础表示，表示矩阵为

$$\hat{G}^{Pd}(g)_{ji} = \begin{cases}1, & \text{当}\ j = l,\ g\cdot g_i = g_l\cdot g^\beta,\quad g^\beta\in G_k^P \\ 0, & \text{当}\ j\neq l\end{cases} \tag{6.4.7}$$

此即(3.2.7)式. 其中小群的元素 g^β 由 g 决定，它满足方程

$$g^\beta(g) = g^{-1}\cdot g\cdot g_i \tag{6.4.8}$$

$g^\beta(g)\in G_k^P$，由(6.4.8)式具体确定. 基础表示的维数为 $n_d = n(G^P)/n(G_k^P) = \dfrac{n(G)}{n(G(k))}$. $n(G)$ 为群 G 的维数，$n(G(k))$ 为小点群 $G(k)$ 的维数.

根据(3.2.12)式，由允许小表示 $G_k^{P(\nu)}$ 诱导出的 G^P 群的诱导表示 $\hat{G}^P(\uparrow G_k^{P(\nu)}) = G^{P(k,\nu)}$ 的表示矩阵为

$$[\hat{G}^P(\uparrow G_k^{P(\nu)})(g)]_{i\alpha,j\beta} = \hat{G}^{P(k,\nu)}(g)_{i\alpha,j\beta}$$
$$= \hat{G}^{pd}(g)_{ij} \cdot \hat{G}_k^{P(\nu)}(g^j(g))_{\alpha\beta} \tag{6.4.9}$$

它是基础表示 $\hat{G}^{pd}$ 与允许小表示的直积，允许小表示 $G_k^{P(\nu)}(g^j(g))$ 的群元素 $g^j \in G_k^P$ 通过(6.4.8)式由元素 $g \in G^P$ 决定.

显然诱导表示的维数为 $n_d \cdot n_\nu(k)$，根据(3.2.5)式它的基矢为

$$\{\Psi_k^{(i)}(\boldsymbol{r}),\ i = 1, 2, \cdots, n_\nu(\boldsymbol{k})\} = \Lambda^{(k)}$$
$$\{\hat{P}(\{\alpha_j \mid \boldsymbol{t}_j\})\Psi_k^{(i)}(\boldsymbol{r}) = \Psi_{\alpha_j k}^{(i)}(\boldsymbol{r}),\ i = 1, 2, \cdots, n_\nu(\boldsymbol{k})\} = \Lambda^{(\alpha_j k)}$$
$$j = 1, 2, \cdots, n_d$$

因而全部基矢张成的表示空间为

$$\Lambda^{\{k^*\}} = \sum_{i=1}^{s(k)} \oplus \Lambda^{(\alpha_i k)} \tag{6.4.10}$$

由于诱导表示的表示空间实质是由波矢 $\boldsymbol{k}$ 的星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 决定，因而诱导表示记为 $\hat{G}^{p(k^*,\nu)}$，它由小群的允许小表示的标记 ν 和小群的波矢 $\boldsymbol{k}$ 及其星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 决定.

诱导表示(6.4.9)式的特征标为

$$\chi^{(k^*,\nu)}(g) = T_r\hat{G}^{P(k^*,\nu)}(g) = \sum_{i\beta} \hat{G}^{pd}(g)_{ii}\hat{G}_k^{P(\nu)}(g^i(g))_{\beta\beta}$$
$$= \sum_i \hat{G}^{Pd}(g)_{ii}\chi_k^{(\nu)}(g^i(g)) = \sum_i{}' \chi_k^{(\nu)}(g^i(g)) \tag{6.4.11}$$

因为当 $g^i(g)$ 满足(6.4.8)式时，$\hat{G}^{Pd}(g)_{ii} = 1$. 因而(6.4.11)式中对 i 的求和只取满足(6.4.8)式的 i(求和号上的′，即表示这种对求和的限制)，$\chi_k^{(\nu)}(g^i(g))$ 为允许小表示的特征标. 由(6.4.8)式，

$$g_i^l(g) = g_l^{-1} \cdot g \cdot g_i$$

在(6.4.11)式中取基础表示的对元角 $\hat{G}^{Pd}(g)_{ii}$，因而(6.4.11)式为

$$\chi^{(k^*,\nu)}(g) = \sum_{g_i \in \Delta_k} \chi_k^{(\nu)}(g_i^{-1} \cdot g \cdot g_i), \quad g_i^{-1} \cdot g \cdot g_i \in G_k^P$$

集合 Δ_k 为陪集代表元素的全体，$\Delta_k = \{\{g_i | \boldsymbol{t}_i\},\ i = 1, 2, \cdots, n_d\}$.

空间群 G^P 的一般元素 $g = \{\alpha | \boldsymbol{t} + \boldsymbol{R}_n\}$，陪集代表元素 $\{\alpha_i | \boldsymbol{t}_i\}$，则

$$g_i^{-1} \cdot g \cdot g_i = \{\alpha_i \mid \boldsymbol{t}_i\}^{-1} \cdot \{\alpha \mid \boldsymbol{t} + \boldsymbol{R}_n\} \cdot \{\alpha_i \mid \boldsymbol{t}_i\}$$
$$= \{\alpha_i^{-1} \cdot \alpha \cdot \alpha_i \mid \alpha_i^{-1} \cdot \boldsymbol{R}_n + \boldsymbol{P}\} \tag{6.4.12}$$

其中

$$\boldsymbol{P} = \alpha_i^{-1} \cdot \alpha \boldsymbol{t}_i - \alpha_i^{-1}\boldsymbol{t}_i + \alpha_i^{-1}\boldsymbol{t} \tag{6.4.13}$$

而

$$\chi_k^{(\nu)}(g_i^{-1} \cdot g \cdot g_i)$$
$$= \chi_k^{(\nu)}(\{\alpha_i^{-1} \cdot \alpha \cdot \alpha_i \mid \boldsymbol{P} + \alpha_i^{-1}\boldsymbol{R}_n\})$$
$$= \begin{cases} e^{-i\alpha_i k \cdot R_n}\chi_k^{(\nu)}(\{\alpha_i^{-1} \cdot \alpha \cdot \alpha_i \mid \boldsymbol{P}\}), & \text{当}\{\alpha_i^{-1} \cdot \alpha \cdot \alpha_i \mid \boldsymbol{P}\} \in G_k^P \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \tag{6.4.14}$$

于是空间群 G^P 的一般元素 $\{\alpha|t+R_n\}$ 的特征标为

$$\chi^{(k^*,\nu)}(\{\alpha'|t+R_n\}) = \sum_{\{\alpha_i|t_i\}\in\Delta_k}\chi_k^{(\nu)}(\{\alpha_i^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha_i|t\})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_i\cdot k\cdot R_n} \quad (6.4.15)$$

6.4.2　关于诱导表示的两个基本定理

定理 6.4.1　由小群 G_k^P 的允许小表示 $G_k^{P(\nu)}$ 诱导出的空间群 G^P 的诱导表示 $\hat{G}^{P(k^*,\nu)}$ 是不可约表示.

证明　空间群元素 $\{\alpha|t\}$ 作用于 Bloch 函数

$$\hat{P}(\{\alpha|t\})\cdot\Psi_k(r) = \Psi'_{\alpha k}(r)$$

即 $\hat{P}(\{\alpha|t\})$ 把表示空间 $\Lambda^{(k^*)}$ 中的子空间 $\Lambda^{(\alpha_j k)}$ 变为另一个子空间，即

$$\hat{P}(\{\alpha|t\})\cdot\Lambda^{\alpha_j k}\Rightarrow\Lambda^{\alpha\cdot\alpha_j k} = \Lambda^{\alpha_j k}$$

因而表示空间 $\Lambda^{(k^*)}$ 中任何一个子空间 $\Lambda^{(\alpha_j k)}$ 对空间群的元素都不是不变子空间. 因而如果诱导表示 $\hat{G}^{P(k^*,\nu)}$ 是可约表示，也就是说表示空间 $\Lambda^{(k^*)} = \sum\oplus\Lambda^{(\alpha_j\cdot k)}$ 至少可分解为两个不变子空间，而且 $\Lambda^{(k^*)}$ 的每一个子空间 $\Lambda^{(\alpha_j k)}$ 由于对空间群都不是不变子空间，因而表示空间 $\Lambda^{(k^*)}$ 的不可约分解只能为

$$\Lambda^{(k^*)} = \Lambda_1^{(k^*)}\oplus\Lambda_2^{(k^*)}$$

其中

$$\Lambda_1^{(k^*)} = \sum_j\oplus\Lambda_1^{(\alpha_j k)},\quad \Lambda_2^{(k^*)} = \sum_j\oplus\Lambda_2^{(\alpha_j k)}$$

它们都是空间群的不变子空间. 因而 $\Lambda_1{}^{(\alpha_j k)}$ 和 $\Lambda_2{}^{(\alpha_j k)}$ 也是空间群子群小群 G_k^P 的不变子空间. 但是允许小表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 是不存在不变子空间的. 因而，上述子空间的分解是不可能的，这就证明了此定理.

定理 6.4.2　由不同允许小表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 诱导出的空间群的表示 $G^{P(k^*,\nu)}$ 和 $G^{P(k^*,\nu')}$ 是不等价的不可约表示. 因而它们的特征标满足正交定理.

$$\frac{1}{n(G^P)} = \sum_{g\in G^P}\chi^{(k^*,\nu)}(g)^*\chi^{(k'^*,\nu')}(g) = \delta_{\{k^*\},\{k\}}\delta_{\nu\nu'} \quad (6.4.16)$$

证明　把特征标(6.4.15)式代入(6.4.16)式得到

$$\frac{1}{n(G^P)}\sum_{\{\alpha|t\}\in G^P}\sum_{R_n\in T_G}\sum_{\{\alpha_i|t_i\}\in\Delta_k}\sum_{\{\beta_j|t_j\}\in\Delta_{k'}}\exp\{-i(\beta_j k'-\alpha_i k\}\cdot R_n]\cdot$$
$$\chi_k^{(\nu)}(\{\beta_j^{-1}\cdot\alpha\cdot\beta_j|P\})^*\chi_{k'}^{(\mu)}(\{\alpha_i^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha_i|P'\})$$

因为

$$\sum_{R_n\in T_G}\exp\{-i(\beta_j k'-\alpha_i k)\cdot R_n\} = n(T_{G_b})\cdot\delta_{\alpha_i k,\beta_j k'}$$

于是上式变为

$$\frac{n(T_G)}{n(G^P)}\sum_{\{\alpha|t\}}\sum_{\{\alpha_i|t_i\}}\sum_{\{\beta_j|t_j\}}\delta_{\alpha_i,k,\beta_j k'}$$
$$\chi_k^{(\nu)}(\{\beta_j^{-1}\cdot\alpha\cdot\beta_j\}|t)^*\chi_{k'}^{(\mu)}(\{\alpha_i^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha_i|t'\}) \quad (6.4.17)$$

上式中对$\{\alpha|\boldsymbol{t}\}$的求和是对空间群$G^P$的展开式.

$$G^P = \sum_{\{\alpha|t\}} \oplus \{\alpha \mid \boldsymbol{t}\} \cdot T_{G_b}$$

中全部$\{\alpha|\boldsymbol{t}\}$进行的，而$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}$和$\{\beta_j|\boldsymbol{t}_j\}$是分别对小群$G_k^P$和$G_{k'}^P$的陪集展开

$$G^P = \sum_{\{\alpha_i|t_i\}} \oplus \{\alpha_i \mid \boldsymbol{t}_i\} \cdot G_k^P,\ G^P = \sum_{\{\beta_j|t_j\}} \oplus \{\beta_j \mid \boldsymbol{t}_j\} \cdot G_{k'}^P$$

中的代表元素$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}$和$\{\beta_j|\boldsymbol{t}_j\}$进行的. 由于

$$\alpha_i \boldsymbol{k} \in \{\boldsymbol{k}^*\},\ \beta_j \boldsymbol{k}' \in \{\boldsymbol{k}^*\}$$

因而只有$\{\boldsymbol{k}^*\} = \{\boldsymbol{k}'^*\}$，(6.4.17)式才不为零，于是(6.4.17)式为

$$\frac{n(T_G)}{n(G^P)} \sum_{\{\alpha_i|t_i\}} \chi_k^{(\nu)}(\{\beta_j^{-1} \cdot \alpha \cdot \beta_j\} \mid \boldsymbol{t})^* \chi_{k'}^{(\mu)}(\{\alpha_i^{-1} \cdot \alpha \cdot \alpha_i \mid \boldsymbol{t}'\}) \delta_{\{k^*\},\{k'^*\}}$$

由于$\{\alpha_i^{-1} \cdot \alpha \cdot \alpha_i|\boldsymbol{t}\} \in G_k^P$，因而$\{\alpha_i^{-1} \cdot \alpha \cdot \alpha_i|\boldsymbol{t}\}$可记为$g_k$，于是上式变为

$$\frac{n(T_G)}{n(G^P)} \sum_{g_k} \chi_k^{(\nu)}(g_k)^* \chi_k^{(\mu)}(g_k) \delta_{\{k^*\},\{k'^*\}}$$

$$= \frac{n(T_G)}{n(G^P)} \frac{n(G^P)}{n(T_G)} \delta_{\nu,\mu} \delta_{\{k^*\},\{k'^*\}} = \delta_{\nu,\mu} \delta_{\{k^*\},\{k'^*\}}$$

亦即

$$\frac{1}{n(G^P)} \sum_{g \in G} \chi^{(k^*,\nu)}(g)^* \chi^{(k'^*,\mu)}(g) = \delta_{\nu,\mu} \delta_{\{k^*\},\{k'^*\}} \tag{6.4.18}$$

这就证明了此定理.

定理 6.4.3 空间群G^P的所有不等价不可约表示都可由不等价的允许小表示诱导而得到，或者说由全部不等价的允许小表示诱导出的空间群的不可约表示是完备的.

说明 如果要证明这个定理，只须证明全部允许小群的诱导表示的维数平方和等于空间群的阶. 诱导表示$G^{P(k^*,\nu)}$的维数为$n_\nu(\boldsymbol{k}) \cdot n_d$. 由定理 6.3.2 知道允许小表示维数的平方和为

$$\sum_\nu n_\nu(\boldsymbol{k})^2 = n(G_k^P)/n(T_G)$$

而$n_d = \dfrac{n(G)}{n(G(k))} \dfrac{n(G^P)}{n(G_k^P)}$，它们分别为点群$G$，空间群$G^P$，小点群$G(k)$和小群$G_k^P$的维数. 于是全部诱导表示维数平方和为

$$\sum_{\{k^*\}} \sum_\nu n_\nu(\boldsymbol{k})^2 \cdot n_d^2 = n(G^P)^2 \sum_{\{k^*\}} \sum_\nu n_\nu(\boldsymbol{k})^2 \cdot \frac{1}{n(G_k^P)^2}$$

$$= n(G^P)^2 \sum_{\{k^*\}} \frac{1}{n(T_G)} \frac{n(G_k^P)}{n(G_k^P)^2}$$

$$= \frac{n(G^P)^2}{n(T_G)} \sum_{\{k^*\}} \frac{1}{n(G_k^P)} \tag{6.4.19}$$

上式中对所有$\boldsymbol{k}$星$\{\boldsymbol{k}^*\}$求和.

第一 Brillouin 区中$\boldsymbol{k}$的数目为$n(T_G)$个，每个波矢星$\{\boldsymbol{k}^*\}$与$\{\boldsymbol{k}'^*\}$或者相等或者完

全不相同，每个$\{k^*\}$中有$n(G^P)/n(G_k^P)$个不同的波矢k，因而

$$\sum_{\{k^*\}} \frac{n(G^P)}{n(G_k^P)} = n(T_G)(\text{全部波矢 } k \text{ 的数目})$$

由此得到(6.4.19)式为

$$\sum_{\{k^*\}} \sum_{\nu} n_\nu(k)^2 \cdot n_d^2 = n(G^P)/n(T_G) \sum_{\{k^*\}} \frac{n(G^P)}{n(G_k^P)} = n(G^P) \qquad (6.4.20)$$

这就证明了这个定理.

这三个定理对空间群的不可约表示非常重要，第一个定理说明由允许小表示诱导出的空间群的表示是不可约表示，第二个定理说明由不等价的小群G_k^P和$G_{k'}^P$的不同允许小表示诱导出的空间群的表示是不等价的不可约表示，第三个定理说明由所有不等价的允许小表示可诱导出空间群的全部不等价不可约表示，这种不等价不可约表示的维数之和等于空间群的阶$n(G^P)$，$(n(G^P)=N_1\cdot N_2\cdot N_3\cdot n(G)=N\cdot n(G))$，$n(G)$为点群$G$的阶. 从而为寻求空间群的不可约表示提供了理论依据和方法.

6.4.3　简单空间群和 Brillouin 区内部的波矢 k 的小群 G_k^P 的允许小表示

由前面讨论已看到，寻求空间群的不可约表示的关键问题是寻求小群的允许小表示.

对于第一 Brillouin 区内部的波矢k(k不在第一 Brillouin 区边界上)所定义的小群G_k^P和简单空间群的所有小群G_k^P(包括第一 Brillouin 区边界上的波矢k所定义的小群G_k^P)，允许小表示十分简单，存在如下定理.

定理 6.4.4　由第一 Brillouin 区内部的波矢k所定义的小群G_k^P(k不在第一 Brillouin 区边界上)和简单空间群的所有小群G_k^P的允许小表示的表示矩阵为

$$G_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|t_i\}) = e^{-ik\cdot t_i}\hat{G}_k^{(\nu)}(\alpha_i) \qquad (6.4.21)$$

其中$\hat{G}_k^{(\nu)}$为小点群$G_{(k)}$的不可约表示.

证明　首先证明(6.4.21)式给出的矩阵是第一 Brillouin 区内部波矢k所定义的小群G_k^P的允许小表示.

小群G_k^P的一般元素为$\{\alpha_i|t_i\}\cdot\{e|R_n\}=\{\alpha_i|\alpha_iR_n+t_i\}$，因而(6.4.21)式给出了小群元素$\{\alpha_i|\alpha_iR_n+t_i\}$与表示矩阵的一种映射关系. 取$g_i=\{\alpha_i|\alpha_iR_n+t_i\}$，$g_j=\{\alpha_j|\alpha_jR_m+t_j\}$，它们之积为

$$\begin{aligned} g_i\cdot g_j &= \{\alpha_i \mid \alpha_iR_n+t_i\}\cdot\{\alpha_j \mid \alpha_jR_m+t_j\} \\ &= \{\alpha_i\cdot\alpha_j \mid \alpha_i\cdot\alpha_jR_m+\alpha_it_j+\alpha_iR_n+t_i\} \end{aligned} \qquad (6.4.22)$$

把(6.4.22)代入(6.4.21)式，得到

$$G_k^{P(\nu)}(g_i\cdot g_j) = \exp\{-ik\cdot(\alpha_iR_n+t_i)\}\cdot\exp\{-ik\cdot(\alpha_jR_m+t_j)\}G_k^{(\nu)}(\alpha_i\cdot\alpha_j) \qquad (6.4.23)$$

因为G_k^ν是小点群$G(k)$的不可约表示，因而

$$G_k^{(\nu)}(\alpha_i\cdot\alpha_j)=G_k^{(\nu)}(\alpha_i)\cdot G_k^{(\nu)}(\alpha_j)$$

而

$$\exp\{-i\boldsymbol{k}\cdot\alpha_i(\alpha_j\boldsymbol{R}_m+\boldsymbol{t}_j)\}=\exp\{-i\alpha_i^{-1}\boldsymbol{k}\cdot(\alpha_j\boldsymbol{R}_m+\boldsymbol{t}_j)\}$$

由于 $\alpha_i\in G(\boldsymbol{k})$，因而 $\alpha_i^{-1}\in G(\boldsymbol{k})$，因此

$$\alpha_i^{-1}\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m$$

于是(6.4.23)式为

$$\begin{aligned}G_k^{P(\nu)}(g_i\cdot g_j)&=e^{-i\boldsymbol{k}_m(\alpha_j\boldsymbol{R}_m+\boldsymbol{t}_j)}\cdot G_k^{P(\nu)}(g_i)\cdot G_k^{P(\nu)}(g_j)\\&=e^{-i\boldsymbol{k}_m\cdot\boldsymbol{t}_j}G_k^{P(\nu)}(g_i)\cdot G_k^{P(\nu)}(g_i)\end{aligned}\tag{6.4.24}$$

对于第一 Brillouin 区内部的波矢 $\boldsymbol{k}$，

$$\alpha_i\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}\quad(\boldsymbol{k}_m=\boldsymbol{0})$$

因而(6.4.24)式为

$$G_k^{P(\nu)}(g_i\cdot g_j)=G_k^{P(\nu)}(g_i)\cdot G_k^{P(\nu)}(g_j)\tag{6.4.25}$$

这表明(6.4.21)式定义的小群元素 g_i 与矩阵的映射关系也保证了元素积之间的映射关系，因而(6.4.21)式所定义的映射确实给出了小群的一种表示.

当取 $g=\{e|\boldsymbol{R}_n\}$ 时，(6.4.21)式给出了对平移子群的分导表示，即

$$\begin{aligned}\hat{T}_G(\downarrow G_k^{P(\nu)})(\{e\mid\boldsymbol{R}_n\})&=G_k^{P(\nu)}(\{e\mid\boldsymbol{R}_n\})=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}\hat{G}_k^{(\nu)}(e)\\&=\hat{I}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}\end{aligned}\tag{6.4.26}$$

$\hat{I}$ 为小点群 $G(k)$ 不可约表示 $\hat{G}_k^{\nu}$ 的单位元所构成的单位矩阵. 由定理 6.3.1 证明了(6.4.21)式给出的小群 G_k^P 的表示是允许小表示.

其次，对于简单空间群，它的元素为 $\{\alpha_i|\boldsymbol{R}_n\}$，不存在非基本平移，$\boldsymbol{t}_i=\boldsymbol{0}$，因而即使对于第一 Brillouin 区边界上的波矢 $\boldsymbol{k}$，由于 $\boldsymbol{t}_i=\boldsymbol{0}$，(6.4.24)式中的相因子仍然为 1，因而对于简单空间群(6.4.21)式给出的表示对所有波矢 $\boldsymbol{k}$ 均为允许小表示. 定理得证.

小点群 G_k 是 32 个晶体学点群之一，它们的不可约表示 $\hat{G}_k^{(\nu)}$ 在第三章中已进行了讨论，因而 $\hat{G}_k^{(\nu)}$ 是完全知道的.

6.4.4 第一 Brillouin 区边界上的 k 所对应的小群 G_k^P 的允许小表示

对于第一 Brillouin 区边界上的 $\boldsymbol{k}$，小点群 $G(\boldsymbol{k})$ 中的点变换 $\alpha_i\in G(\boldsymbol{k})$，作用于 $\boldsymbol{k}$ 则为

$$\alpha_i\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m,\quad\alpha_i\in G(\boldsymbol{k})$$

因而(6.4.21)式不等于(6.4.24)式，从而说明(6.4.21)式并不是小群 G_k^P 的表示. 因而，对这种小群需要另行寻求它的允许小表示.

为了解决这一问题需要引入有限群的投影表示.

1. 投影表示

在群表示理论中，n 维表示空间的基矢为 $\{\psi_1,\psi_2,\psi_3,\cdots,\psi_n\}$，群 G 的元素 g 所对应的算子为 $\hat{P}(g)$，表示矩阵为 $\hat{G}(g)$，则

$$\hat{P}(g)\psi_i=\sum_j\hat{G}(g)_{ji}\psi_j$$

群算子 $\hat{P}(g)$ 与表示矩阵 $\hat{G}(g)$ 同态，即

$$\hat{P}(g)\to\hat{G}(g),\quad \hat{P}(g\cdot g')\to\hat{D}(g)\cdot\hat{D}(g')$$

可以把这种表示加以推广，而得到投影表示. 如果令群算子 $\hat{P}(g)$ 对基矢 ψ_i 的作用的变化规律为

$$\hat{P}(g)\cdot\psi_i=\varepsilon(g)\sum_j D_{ji}(g)\psi_j \tag{6.4.27}$$

它与通常表示之不同在于算子 $\hat{P}(g)$ 作用于基矢 ψ_j 除按表示矩阵 $\hat{D}(g)$ 变换外，还增加一个由群元素 g 决定的相因子 $\varepsilon(g)$，

$$\varepsilon(g)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(g)}\quad 或\quad \varepsilon(g_j)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(g_j)} \tag{6.4.28}$$

此时对元素 $g\cdot g'$ 的群算子 $\hat{P}(g\cdot g')$ 则为

$$\begin{aligned}\hat{P}(g\cdot g')\psi_i&=\varepsilon(g\cdot g')\sum_j D_{ji}(g\cdot g')\psi_j\\&=\varepsilon(g\cdot g')\sum_j\Big[\sum_k D_{jk}(g)\cdot D_{ki}(g')\Big]\psi_j\\&=\frac{\varepsilon(g\cdot g')}{\varepsilon(g)\cdot\varepsilon(g')}\sum_j\Big[\sum_k D_{jk}(g)\cdot D_{ki}(g')\Big]\psi_j\end{aligned} \tag{6.4.29}$$

令

$$\check{D}(g)=\varepsilon(g)\hat{D}(g) \tag{6.4.30}$$

若 $\check{D}(g)$ 满足关系

$$\check{D}(g)\cdot\check{D}(g')=\frac{\varepsilon(g\cdot g')}{\varepsilon(g)\varepsilon(g')}\check{D}(g\cdot g') \tag{6.4.31}$$

则(6.4.27)和(6.4.29)式分别变为

$$\begin{cases}\hat{P}(g)\psi_i=\sum_j\check{D}_{ji}(g\cdot g')\psi_j\\ \hat{P}(g\cdot g')\psi_i=\sum_j\check{D}_{ji}(g\cdot g')\psi_j\end{cases} \tag{6.4.32}$$

因而 $\check{D}(g)$ 构成群 G 的表示，称这种表示为投影表示. 令

$$\frac{\varepsilon(g\cdot g')}{\varepsilon(g)(g')}=[g,g']$$

或

$$\frac{\varepsilon(g_i\cdot g_j)}{\varepsilon(g_i)\varepsilon(g_j)}=\frac{\varepsilon(i,j)}{\varepsilon(i)\varepsilon(j)}=[i,j]$$

称为投影表示的相因子，对于 $n(G)$ 阶的群 G，投影表示包括 $n(G)^2$ 个相因子，全部相因子的总体称为相因子组. 为了保证确实构成群的表示，要求 $n(G)^2$ 个相因子之间满足条件

$$[g_i,g_j][g_i\cdot g_j,g_k]=[g_i,g_j\cdot g_k][g_j,g_k] \tag{6.4.33}$$

可以证明关系式(6.4.33)是构成投影表示的充要条件.

相因子 $\varepsilon(g_i)$ 是可以不同选择的，称这种不同选择为投影表示的规范变换，比如 $\check{G}(g_i)$ 是群 G 的一个投影表示，则

$$\check{D}'(g_i)=\beta(g_i)\check{D}(g_i)$$

是另一种投影表示，称 $\check{D}'$ 与 $\check{D}$ 是规范等价的投影表示. 规范等价的投影表示的相因子组之间存在变换

$$[g_i,g_j]'=\beta(g_i)\beta(g_j)\beta(g_i\cdot g_j)^{-1}[g_i,g_j] \tag{6.4.34}$$

$[g_i,g_j]'$ 与 $[g_i,g_j]$ 分别为投影表示 $\check{D}'$ 和 $\check{D}$ 的相因子. 因而可以通过规范变换使投影表示单位元素 e 的相因子为 1，即

$$[e,e]=\frac{\varepsilon(e,e)}{\varepsilon(e)\varepsilon(e)}=1 \tag{6.4.35}$$

称这种投影表示为标准化的投影表示，此时投影表示对单位元的投影矩阵为单位矩阵，即

$$\check{D}(e)=I$$

通过规范变换也可选择相因子组所构成的 $n(G)$ 阶的矩阵 $[g_i,g_j]$ 为单模矩阵，即

$$\det|[g_i,g_j]|=1 \tag{6.4.36}$$

称相因子组满足条件(6.4.34)和(6.4.35)式的投影表示为标准规一化投影表示，一般都讨论这种形式的投影表示.

对于投影表示也可定义等价表示，即若 $\check{D}$ 和 $\check{D}'$ 是群 G 的两个投影表示，如果存在非奇矩阵 $\hat{S}$ 使

$$\hat{S}\cdot\check{D}'(g)\cdot\hat{S}^{-1}=\check{D}(g),\quad g\in G$$

则 $\check{D}$ 与 $\check{D}'$ 为等价投影表示. 同样可定义可约表示与不可约表示. 若对于群 G 的投影表示 $\check{D}(g)$ 存在非奇矩阵 $\hat{S}$ 使

$$\hat{S}\cdot\check{D}(g)\cdot\hat{S}^{-1}=\begin{pmatrix}\check{D}_1(g) & O\\ O & \check{D}_2(g)\end{pmatrix},\quad g\in G$$

则 $\check{D}$ 是可约表示，否则则为不可约表示.

投影表示也存在如下的广义正交定理.

定理 6.4.4(投影表示的广义正交定理)　若 $\check{D}^{(\nu)}$ 与 $\check{D}^{(\mu)}$ 是群 G 的两个不可约投影表示，则

$$\sum_{g\in G}\check{D}^{(\nu)}(g^{-1})_{ij}\check{D}^{(\mu)}(g)_{kl}[g\cdot g^{-1}]^{-1}=\frac{n(G)}{n(\nu)}[e,e]\delta_{\mu,\nu}\delta_{il}\delta_{jk} \tag{6.4.37}$$

对标准归一化的投影表示 $[e,e]=1$.

这个定理的证明与一般表示理论正交定理的证明方法相似，证明时只须考虑到相因子的性质即可，这里就不讨论了.

同样可定义投影表示的特征标为

$$\check{\chi}(g)=\mathrm{Tr}\check{D}(g) \tag{6.4.38}$$

并存在特征标的正交定理，它为

$$\sum_{g\in G}\check{\chi}^{(\nu)}(g)^*\check{\chi}^{(\mu)}(g)=n(G)\delta_{\mu,\nu} \tag{6.4.39}$$

这与一般表示特征正交定理在形式上是一样的. 但是要注意，由于相因子的关系，对于

投影表示同一类的元素 g 与 $g_i\cdot g\cdot g_i^{-1}$ 的特征标是不相同的，因为

$$\chi(g)=\mathrm{Tr}\check{D}(g)=\varepsilon(g)\mathrm{Tr}\check{D}(g)$$

而

$$\begin{aligned}\chi(g_i\cdot g\cdot g_i^{-1})&=\mathrm{Tr}\check{D}(g_i\cdot g\cdot g_i^{-1})\\&=\varepsilon(g_i\cdot g\cdot g_i^{-1})\mathrm{Tr}\hat{D}(g_i\cdot g\cdot g_i^{-1})\end{aligned}$$

一般情况下 $\varepsilon(g)\neq\varepsilon(g_i\cdot g\cdot g_i^{-1})$，因而不等价不可约投影表示的数目并不等于类的数目，但是由广义正交定理(6.4.36)式可得到

$$\sum_{\nu}n(\nu)^2=n(G) \tag{6.4.40}$$

即不等价不可约投影表示维数 $n(\nu)$ 的平方和等于群的阶数.

当投影表示的全部相因子$[g_i, g_j]$均为 1 时，投影表示就变为一般的表示. 有的书为了与投影表示相区别而称一般表示为向量表示. 关于投影表示的进一步讨论可参阅 Altmann S L 的专著"Induced Representation in Crystals and Molecules" Academic Press (1977).

2. 用投影表示确定 Brillouin 区边界上 $\boldsymbol{k}$ 所定义的小群的表示

为了解决 Brillouin 区边界上 $\boldsymbol{k}$ 所对应的小群 G_k^P 的允许小表示问题，引入投影表示. 下面证明对于小群 G_k^P 的允许小表示 $G_k^{P(\nu)}$ 与小商群 G_k^P/T_{G_b} 的投影表示间的关系.

定理 6.4.5　若 $G_k^{P(\nu)}$ 是小群 G_k^P 的允许小表示，则矩阵

$$\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_{G_b})=\exp\{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_i\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})\} \tag{6.4.41}$$

是小商群 G_k^P/T_{G_b} 的不可约投影表示.

证明　小商群 G_k^P/T_{G_b} 的元素是平移子群 T_{G_b} 的陪集，即

$$\{\{\alpha_1|\boldsymbol{t}_1\}\cdot T_{G_b},\ \{\alpha_2|\boldsymbol{t}_2\}\cdot T_{G_b},\ \cdots,\},\ \alpha_i\in G(k)$$

每个陪集

$$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_{G_b}$$

有 $N_1N_2N_3$ 个空间群 G^P 的元素$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot\{e|\boldsymbol{R}_n\}$，陪集可以选取不同的代表元素，从而用不同形式表述. 因而证明这个定理首先须证明(6.4.41)式所描述的矩阵与同一陪集的代表元素$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}$的选取无关. 如果陪集

$$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_{G_b}=\{\alpha_j|\boldsymbol{t}_j\}\cdot T_{G_b}$$

则代表元素

$$\{\alpha_j|\boldsymbol{t}_j\}\in\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_G$$

一定可写为

$$\{\alpha_j|\boldsymbol{t}_j\}=\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\{e|\alpha_i^{-1}\boldsymbol{t}_j-\boldsymbol{t}_i\}$$

于是根据(6.4.41)式矩阵

$$\begin{aligned}\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_j\mid\boldsymbol{t}_j\}\cdot T_{G_b})&=\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_j}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_j\mid\boldsymbol{t}_j\})\\&=\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_j}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i\mid\boldsymbol{t}_i\}\cdot\{e\mid\alpha_i^{-1}\boldsymbol{t}_j-\boldsymbol{t}_i\})\\&=\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_j}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i\mid\boldsymbol{t}_i\})\cdot\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{e\mid\alpha_i^{-1}\boldsymbol{t}_j-\boldsymbol{t}_i\})\end{aligned}$$

而

$$\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha|\alpha_i^{-1}t_j-t_i\})=e^{-ik\cdot(\alpha_i^{-1}t_j-t_i)}$$

于是上式为

$$\begin{aligned}\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_j\mid t_j\}\otimes T_G)&=e^{ik\cdot t_j}e^{-ik\cdot(\alpha_i^{-1}t_j-t_i)}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i\mid t_i\})\\&=e^{ik\cdot t_i}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i\mid t_i\})\\&=\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i\mid t_i\}\cdot T_G)\end{aligned}\tag{6.4.42}$$

从而说明(6.4.41)式给出的矩阵 $\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|t_i\}\otimes T_G)$ 与小商群元素(陪集)一一对应，与陪集的代表元素选取无关.

进而须证明 $\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|t_i\}\cdot T_G)$ 是投影表示. 为此须寻求它们的相因子.

按空间群元素的乘法规则，存在

$$\{\alpha_i|t_i\}\cdot\{\alpha_j|t_j\}=\{\alpha|t\}\{e|\alpha^{-1}t\}\tag{6.4.43}$$

其中

$$\alpha=\alpha_i\cdot\alpha_j,\quad r=\alpha_i t_j+t_i-t$$

因而小商群元素(陪集)的乘积为

$$[\{\alpha_i|t_i\}\cdot T_G]\cdot[\{\alpha_j|t_j\}\cdot T_G]=[\{\alpha|t\}\cdot T_G]\tag{6.4.44}$$

由此可得到小群 G_k^P 的允许小表示之积为

$$\begin{aligned}&\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i\mid t_i\})\cdot\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_j\mid t_j\})\\&=\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i\mid t_i\}\cdot\{\alpha_j\mid t_j\})\\&=\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha\mid t\})\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{e\mid \alpha^{-1}r\})\\&=e^{-ikk\cdot\alpha^{-1}t}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha\mid t\})\\&=e^{-ik\cdot t}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha\mid t\})\end{aligned}$$

因为 $e^{-ik\cdot\alpha^{-1}t}=e^{-i\alpha k\cdot t}$，因此(6.4.31)式为

$$\begin{aligned}&\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i\mid t_i\}\cdot T_G)\cdot\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_j\mid t_j\}\cdot T_G)\\&=e^{ik\cdot(t_i+t_j)}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i\mid t_i\})\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_j\mid t_j\})\\&=e^{ik(t_i+t_j-t)}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha\mid t\})\\&=e^{ik\cdot(t_i+t_j-t)}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha\mid t\}\cdot T_G)\\&=e^{ik\cdot(t_j-\alpha_i\cdot t_j)}\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha\mid t\}\cdot T_G)\end{aligned}\tag{6.4.45}$$

如此就得到了相因子

$$[\{\alpha_i\mid t_j\}\cdot T_G,\{\alpha_j\mid t_j\}\cdot T_G]=e^{-ik\cdot(\alpha_i t_j-t_j)}=e^{-ik_i\cdot t_j}\tag{6.4.46}$$

$$k\cdot(\alpha_i t_j-t_j)=(\alpha_i^{-1}k-k)\cdot t_j=k_m\cdot t_j$$

其中 k_m 为一倒易点阵的格点.

容易看到(6.4.46)式给出的相因子满足投影表示的充要条件(6.4.33)式，从而证明了(6.4.41)式为小商群 $G(k)/T_G$ 的投影表示.

小商群 G_k^P/T_{G_b} 的单位元素为 $\{e|\mathbf{0}\}\cdot T_{G_b}$，因而单位元的相因子为

$$[\{e|\mathbf{0}\}\cdot T_{G_b},\ \{e|\mathbf{0}\}\cdot T_{G_b}]=1$$

或单位元的表示矩阵为单位矩阵，即

$$\check{G}_k^{P(\nu)}(\{e|\mathbf{0}\}\cdot T_G)=\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{e|\mathbf{0}\}\cdot T_G)=\hat{I}$$

因而这种投影表示是标准化投影表示.

上述定理说明了由小群的允许不可约表示 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 构造小商群的投影表示 $\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_G)$ 的方法. 另一方面，如果有了小商群的不可约投影表示，则可由它构造小群的允许表示，关于这一问题存在如下定理.

定理 6.4.7　如果 $\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_G)$ 是小商群 G_k^P/T_{G_b} 的投影表示，而且相因组满足(6.4.46)式，则

$$\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_i}\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_G)\tag{6.4.47}$$

为小群 G_k^P 的表示；若小商群 G_k^P/T_{G_b} 的投影表示 $\check{G}_k^{P(\nu)}$ 是不可约表示，则(6.4.47)式所给出的小群的表示也是不可约的，而且也是小群 G_k^P 的允许小表示. 由全部不可约投影表示通过(6.4.47)式可得到全部允许小表示.

证明　下面分三个方面证明这一定理.

(1) (6.4.47)式是小群的表示和不可约表示. 由于 $\check{G}_k^{P(\nu)}$ 是小商群 G_k^P/T_{G_b} 的投影表示，并且相因子满足(6.4.26)式，因而两个群元素 $\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_G$ 和 $\{\alpha_j|\boldsymbol{t}_j\}\cdot T_G$ 的投影表示矩阵之积，满足(6.4.45)式，于是可得到由(6.4.47)式定义的小群的两个元素 $\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}$ 和 $\{\alpha_j|\boldsymbol{t}_j\}$ 的矩阵 $\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})$ 和 $\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_j|\boldsymbol{t}_j\})$ 之积满足

$$\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})\cdot\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_j|\boldsymbol{t}_j\})=\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot\{\alpha_j|\boldsymbol{t}_j\})$$

从而证明了(6.4.47)式给出了小群的表示. (6.4.47)式给出的小群的表示矩阵 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 与小商群的投影表示矩阵 $\check{G}_k^{P(\nu)}$ 只差一个相因子，因而，如果投影表示是不可约表示，则 $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 也是不可约表示.

(2) $\hat{G}_k^{P(\nu)}$ 是允许小表示. 由于相因子满足(6.4.46)式，这种投影表示是标准化投影表示，因而单位元 T_{G_b} 的投影表示矩阵具有形式

$$\check{G}_k^{P(\nu)}(\{e|\boldsymbol{t}\}\otimes T_G)=\check{G}_k^{P(\nu)}(T_G)=\hat{I}$$

因而(6.4.47)式给出的小群的表示为

$$\begin{aligned}\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{e\mid\boldsymbol{t}\})&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}}\check{G}_k^{P(\nu)}(\{T_G\mid\boldsymbol{t}\}\cdot T_G)\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}}\check{G}_k^{P(\nu)}(T_G)\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}}\hat{I}\end{aligned}$$

由定理 6.3.1 关于允许小表示的充要条件可看到 $\hat{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha|\boldsymbol{t}\})$ 是允许小表示.

(3) 关于这种允许小表示的完备性. 由投影表示的广义正交定理 6.4.4 得到的不可约投影表示的维数之和的(6.4.40)式可得到小商群不可约投影表示的维数 $n(\check{G}_k^{P(\nu)})$ 的平方和等于小商群的阶数 $n(G_k^P)/n(T_G)$，小商群的阶数等于小点群 $G(k)$ 的阶数，即

$$n(G_k^P/T_G) = n(G(k))$$

因而得到

$$\sum_\nu n(\check{G}_k^{P(\nu)})^2 = n(G_k^P/T_G) = n(G_k^P)/n(T_G)$$

由定理6.3.2可看到这正是全部允许小表示维数平方和所满足的公式，因而证明了由小商群的全部不可约投影表示构造的允许小表示是完备的，即得到了所有可能的允许小表示.

对于不存在非基本平移的简单空间群，小商群的元素，即平移群的陪集为$\{\alpha_i|\mathbf{0}\}\cdot T_G$，此时投影表示的全部相因子为$I$，投影表示就是一般的表示. 对于非简单空间群，第一Brillouin区内部的波矢向量$\boldsymbol{k}$所对应的小群G_k^P，由于$\alpha_i\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}$，因而相因子(6.4.45)式中$\boldsymbol{k}_m=\mathbf{0}$，于是相因子也为1，于是小商群的投影表示也变为一般表示. 这样本节的内容就变成了(6.4.3)节所讨论的内容，也就是说定理6.4.7变成了定理6.4.4，(6.4.47)式变成了(6.4.21)式. 因而本节实际上仅对非简单空间群Brilleuin区边界上的$\boldsymbol{k}$所对应的小群才是有实际价值的.

6.4.5 构造空间群不可约表示的基本方法

根据定理6.4.1可由空间群G^P的小子群G_k^P的允许小表示$\hat{G}_k^{P(\nu)}$诱导出空间群G^P的不可约表示$\hat{G}^{P(k^*\nu)}$，从定理6.4.2得到由全部允许小表示可诱导出空间群的所有的不可约表示. 因而构造空间群不可约表示的问题归结为寻求以各种波矢向量$\boldsymbol{k}$标记的小群G_k^P的所有允许小表示$\hat{G}_k^{P(\nu)}$，然后再构造出基础表示$\hat{G}^{Pd}$，从而就可由(6.4.9)式得出空间群的不可约表示$\hat{G}^{P(k^*\nu)}$，空间群不可约表示由诱导出它的小群G_k^P的允许小表示的不可约标记(ν)和小群的波矢$\boldsymbol{k}$所属的$\boldsymbol{k}$星$\{k^*\}$来标记，这种不可约表示的基矢为$\{k^*\}$中全部波矢$\boldsymbol{k}$所标记Bloch函数构成.

因而找到小群G_k^P的全部允许小表示对于构造空间群的全部不等价不可约表示具有十分重要的作用. 解决这一问题实际上是寻找小商群G_k^P/T_{G_b}的全部不可约投影表示$\check{G}_k^{P(\nu)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_G)$，然后通过(6.4.47)式构造允许小表示. 由于小商群的维数很低，它的不可约投影表示是容易得到的. 在kovalev, O.V所著“Irreducible Representations of the Space Groups”一书中给出了230个空间群的一些对称点的波矢$\boldsymbol{k}$的小商群G_k^P/T_G的全部投影表示.

前面已指出，对于简单空间群和非简单空间群Brillouin区内部的波矢$\boldsymbol{k}$，投影表示转化为一般表示，因而只有对于非简单空间群Brillouin区边界上的波矢及其星所确定的不可约表示时才真正需要投影表示.

对一定空间群G^P，为了得到一定波矢$\boldsymbol{k}$的不可约表示，需要找到小点群$G(\boldsymbol{k})$和点操作集合$S(\boldsymbol{k})$，从$S(\boldsymbol{k})$得到

$$\boldsymbol{k}^* = \{\boldsymbol{k}, \alpha_1\boldsymbol{k}, \alpha_2\boldsymbol{k}, \cdots, \alpha_{n(s)}\boldsymbol{k}\}, \quad \alpha_i \in S(\boldsymbol{k})$$

因而可把第一Brillouin区的波矢$\boldsymbol{k}$分为二类：

(1) 小点群$G(\boldsymbol{k})$为G的平庸子群$C_1=\{e\}$的$\boldsymbol{k}$. 这种$\boldsymbol{k}$称为Brillouin区中的一般

点，它们对点群 G 没有对称性，即

$$\alpha_i \boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_m, \quad \alpha_i \in G, \ \alpha_i \neq e$$

对于一般点的 $\boldsymbol{k}$，它的星包括 $n(G)$ 个 $\boldsymbol{k}$，即

$$\{\boldsymbol{k}\} = \{\alpha_i \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_i, \ \alpha_i \in G\}$$

一般 $\boldsymbol{k}$ 点的小群 G_k^P 为平庸子群 T_{G_b}.

(2) 具有一定对称性的 $\boldsymbol{k}$. 这类 $\boldsymbol{k}$ 包括第一 Brillouin 区中的对称点，对称线和对称面. 在图 6.1.1 中给出了简单立方 Brillouin 区中的对称点 Γ, R, X, M, Δ 和对称线对称面 Σ, Λ, S, Z, T 的点 $\boldsymbol{k}$，它们的小点群为 G 的子群，有一定阶的星.

对于这类波矢 $\boldsymbol{k}$，由相应的星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 标记的空间群的不可约表示，可按前面讨论的方法由具体的小群 G_k^P 的诱导表示和基础表示进行构造.

第一种没有点群对称性的一般点的波矢 $\boldsymbol{k}$，不可约表示变得比较简单了. 在这种情况下，小群 $G_k^P = T_{G_b}$，因而允许小表示为

$$\hat{T}^k_{G_b}(\{e|\boldsymbol{R}_n\}) = \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}$$

不可约表示的基函数为 Bloch 函数.

$$\Psi_k(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}} U(\boldsymbol{r}), \quad U(\boldsymbol{r}) = U(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}_n)$$

相应的基础表示为正则表示，维数为 $n(G)$. 根据(1.12.3)式，正则表示的表示矩阵为

$$G^L(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})_{\mu\nu} = \begin{cases} 1, & \text{当}\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot\{\alpha_\nu|\boldsymbol{t}_\nu\} = \{\alpha_\mu|\boldsymbol{t}_\mu\} \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \tag{6.4.48}$$

利用这些方法就可求出空间群的全部不可约表示了.

6.5　空间群不可约表示举例

为具体了解空间群的不可约表示，在本节中，讨论几种空间群的不可约表示.

6.5.1　空间群 O^3 三种波矢的不可约表示

空间群 O^3 国际符号为($F432$)，它的 Bravias 点阵为面心型，倒易点阵为体心立方. 图 6.1.2 给出了波矢空间第一 Brillouin 区的图形，为一截角八面体(或称 14 面体). 以 Γ 点为 Brillouin 区原点，坐标为(0, 0, 0)，X 点代表倒易空间正四边形的面心，坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$. 下面给出它的星所标记的空间群 O^3 的不可约表示和一般 $\boldsymbol{k}$ 的不可约表示.

O^3 为简单空间群，O_h 为它的平移子群，O^3 按平移子群的陪集分解为

$$O^3 = \sum_{\alpha_i \in O} \oplus \{\alpha_i \mid \boldsymbol{0}\} T_{O_h} \tag{6.5.1}$$

点子群为 O 群.

对波矢 $\boldsymbol{k} = (0, 0, 0)$ 的 Γ 点，小商群同构于点子群，即

$$O^3 / T_{O_h} \sim O$$

因而小商群 O^3/T_{O_h} 有 24 个元素，即

$$\{\alpha_i|\mathbf{0}\}T_{O_h},\quad \alpha_i\in O$$

相应的小点群为 O 群，O 群的全部元素作用于 $\boldsymbol{k}(0,0,0)$ 均使它不变，即

$$\alpha_i\boldsymbol{k}(0,0,0)=\boldsymbol{k}(0,0,0),\quad \alpha_i\in O$$

因而

$$\boldsymbol{k}=\frac{2\pi}{a}(0,0,0)^*=\{\boldsymbol{k}(0,0,0)\}$$

即 $\boldsymbol{k}(0,0,0)^*$ 只有一个 $\boldsymbol{k}(0,0,0)$.

X 点的 $\boldsymbol{k}'(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$（以 $\boldsymbol{b}_1'=\frac{2\pi}{a}(\bar{1},1,1)$，$\boldsymbol{b}_2'=\frac{2\pi}{a}(1,\bar{1},1)$，$\boldsymbol{b}_3'=\frac{2\pi}{a}(1,1,\bar{1})$ 为基矢），小点群为 D_4. D_4 群包括 8 个元素，它们使

$$\alpha_i\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)=\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)+\boldsymbol{k}_m,\quad \alpha_i\in D_4$$

O 群除子群 D_4 外的其它元素 C_3，C_3^2（共 3 个 C_3 轴，总共为 8 个元素）构成集合 $S\left(\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)\right)$，它们使 $\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$ 变为

$$C_3\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)=\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}),$$

$$C_3^2\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)=\boldsymbol{k}(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$$

因而

$$\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)^*=\left\{\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0),\ \boldsymbol{k}(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}),\ \boldsymbol{k}(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})\right\}$$

下面分别讨论空间群 O^3 的不可约表示 $O^{3\Gamma(\boldsymbol{k}^*)}$ 和 $O^{3X(\boldsymbol{k}^*)}$.

1. 空间群 O^3 的不可约表示 $O^{3\Gamma(0^*)}$

波矢 $\boldsymbol{k}=(0,0,0)=\mathbf{0}$，它的小点群为 O 群，因而相应的小群 $O_0^3=O^3$. 显然，这个小群的基础表示为 1，因而由小群 O_0^3 诱导出的不可约表示即为小群的允许小表示本身. 而由(6.4.21)式得到允许小表示就是点群 O 群的不可约表示. 这样就得到空间群 O^3 对 $\boldsymbol{k}=\mathbf{0}$ 的不可约表示为

$$\hat{O}^{3\Gamma(\mathbf{0}^*)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{R}_n\})=\hat{O}^{\Gamma}(\alpha_i)\tag{6.5.2}$$

$\hat{O}^{\Gamma}$ 为 O 群不可约表示 Γ. 对于 O 群 $\Gamma=A_1, A_2, E, T_1, T_2$. 而不可约表示 $\hat{O}^{(T_2)}=\hat{O}^{(A_2)}\otimes\hat{O}^{(T_1)}$，因而只须求出表示矩阵 $\hat{O}^{(A_1)}$，$\hat{O}^{(A_2)}$，$\hat{O}^{(E)}$，$\hat{O}^{(T_1)}$ 就解决了 O^3 群的不可约表示 $\hat{O}^{3\Gamma(\mathbf{0}^*)}$ 的问题.

(6.5.2)式给出的空间群 O^3 的 $\boldsymbol{k}=\mathbf{0}$ 的不可约表示，对所有空间群 $\boldsymbol{k}=\mathbf{0}$ 的不可约表示具有普遍性. 任何空间群 G^P 当 $\boldsymbol{k}=\mathbf{0}$ 时，$G_0^P=G^P$，因而小商群

$$G_0^P/T_{G_b}\sim G$$

由它诱导出的空间群 G^P 的不可约表示 $G^{P\Gamma(\mathbf{0}^*)}$ 均为

$$G^{P\Gamma(0*)}(\{\alpha_i|R_n\})=\hat{G}^{\Gamma}(\alpha_i)$$

G^{Γ} 为点群 G 的不可约表示 Γ 的表示矩阵.

2. 空间群 O^3 的不可约表示 $O^{3(x*)}$

对于 X 点的 $k=(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$，相应小群为

$$O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}(\{\alpha_i|R_n\}),\quad \alpha_i\in D_4$$

小点群 D_4 有 5 个不可约表示 $\Gamma=A_1$, A_2, B_1, B_2, E 由(6.4.20)式允许小表示为

$$\hat{O}^{3\Gamma}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}(\{\alpha_i|R_n\})=e^{-ik\cdot R_n}\hat{D}^{\Gamma}(\alpha_i),\quad k=(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)\tag{6.5.3}$$

$\hat{D}^{\Gamma}(\alpha_i)$为 D_4 群的不可约表示 $\Gamma(\Gamma=A_1, A_2, B_1, B_2, E)$. 为了构造诱导表示，首先需要构造基础表示.

空间群 O^3 按小群 $O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}$ 的陪集分解为

$$O^3=O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}\oplus\{C_3|0\}\cdot O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}\oplus\{C_3^2|0\}\cdot O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}$$

因而以$\{O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}, \{C_3|0\}\cdot O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}, \{C_3^2|0\}\cdot O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}\}$为基矢的基础表示 $\hat{O}^{3d}$是三维表示.

由(6.4.7)式得到基础表示的表示矩阵 $\hat{O}^{3d}$为

$$\begin{aligned}&\hat{O}^{3d}(\{\alpha|R_n\})_{ji}\\&=\hat{O}^{3d}(\{\alpha|0\})_{ji}\\&=\begin{cases}1, & 当 j=l,\ \{\alpha|0\}\cdot\{\alpha_i|0\}=\{\alpha_l|0\}\cdot\{\alpha_k|0\}\\0, & 其它\end{cases}\end{aligned}$$

上式中 $\alpha_k\in D_4$.

为了具体计算出基础表示，下面给出 O 群的 24 个元素：

$\alpha_1=e$, $\alpha_2=C_{100}(\pi)$, $\alpha_3=C_{010}(\pi)$, $\alpha_4=C_{001}(\pi)$

$\alpha_5=C_{111}(\frac{4\pi}{3})$, $\alpha_6=C_{11\bar{1}}(\frac{2\pi}{3})$, $\alpha_7=C_{\bar{1}11}(\frac{2\pi}{3})$, $\alpha_8=C_{1\bar{1}1}(\frac{2\pi}{3})$

$\alpha_9=C_{111}(\frac{2\pi}{3})$, $\alpha_{10}=C_{1\bar{1}1}(\frac{4\pi}{3})$, $\alpha_{11}=C_{11\bar{1}}(\frac{4\pi}{3})$, $\alpha_{12}=C_{\bar{1}11}(\frac{4\pi}{3})$

$\alpha_{13}=C_{\bar{1}10}(\frac{4\pi}{3})$, $\alpha_{14}=C_{001}(\frac{\pi}{2})$, $\alpha_{15}=C_{001}(\frac{3\pi}{2})$, $\alpha_{16}=C_{110}(\pi)$

$\alpha_{17}=C_{0\bar{1}1}(\pi)$, $\alpha_{18}=C_{011}(\pi)$, $\alpha_{19}=C_{100}(\frac{\pi}{2})$, $\alpha_{20}=C_{1001}(\frac{3\pi}{2})$

$\alpha_{21}=C_{\bar{1}01}(\pi)$, $\alpha_{22}=C_{010}(\frac{3\pi}{2})$, $\alpha_{23}=C_{101}(\pi)$, $\alpha_{24}=C_{010}(\frac{\pi}{2})$

在下表中给出了 O 群元素的乘法表. 符号 $\alpha_{\alpha\beta\gamma}(\psi)$中 $\alpha\beta\gamma$ 为旋转轴的坐标，ψ 为转角.

α	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
2	2	1	4	3	6	5	8	7	10	9	12	11	14	13	16	15	18	17	20	19	22	21	24	23
3	3	4	1	2	7	8	5	6	11	12	9	10	15	16	13	14	19	20	17	18	23	24	21	22
4	4	3	2	1	8	7	6	5	12	11	10	9	16	15	14	13	20	19	18	17	24	23	22	21
5	5	8	6	7	9	12	10	11	1	4	2	3	17	20	18	19	21	24	22	23	13	16	14	15
6	6	7	5	8	10	11	9	12	2	3	1	4	18	19	17	20	22	23	21	24	14	15	13	16
7	7	6	8	5	11	10	12	9	3	2	4	1	19	18	20	17	23	22	24	21	15	14	16	13
8	8	5	7	6	12	9	11	10	4	1	3	2	20	17	19	18	24	21	23	22	16	13	15	14
9	9	11	12	10	1	3	4	2	5	7	8	6	21	23	24	22	13	15	16	14	17	19	20	18
10	10	12	11	9	2	4	3	1	6	8	7	5	22	24	23	21	14	16	15	13	18	20	19	17
11	11	9	10	12	3	1	2	4	7	5	6	8	23	21	22	24	15	13	14	16	19	17	18	20
12	12	10	9	11	4	2	1	3	8	6	5	7	24	22	21	23	16	14	13	15	20	18	17	19
13	13	15	14	16	21	23	22	24	17	19	18	20	1	3	2	4	9	11	10	12	5	7	6	8
14	14	16	13	15	22	24	21	23	18	20	17	19	2	4	1	3	10	12	9	11	6	8	5	7
15	15	13	16	14	23	21	24	22	19	17	20	18	3	1	4	2	11	9	12	10	7	5	8	6
16	16	14	15	13	24	22	23	21	20	18	19	17	4	2	3	1	12	10	11	9	8	6	7	5
17	17	18	20	19	13	14	16	15	21	22	24	23	5	6	8	7	1	2	4	3	9	10	12	11
18	18	17	19	20	14	13	15	16	22	21	23	24	6	5	7	8	2	1	3	4	10	9	11	12
19	19	20	18	17	15	16	14	13	23	24	22	21	7	8	6	5	3	4	2	1	11	12	10	9
20	20	19	17	18	16	15	13	14	24	23	21	22	8	7	5	6	4	3	1	2	12	11	9	10
21	21	24	23	22	17	20	19	18	13	16	15	14	9	12	11	10	5	8	7	6	1	4	3	2
22	22	23	24	21	18	19	20	17	14	15	16	13	10	11	12	9	6	7	8	5	2	3	4	1
23	23	22	21	24	19	18	17	20	15	14	13	16	11	10	9	12	7	6	5	8	3	2	1	4
24	24	21	22	23	20	17	18	19	16	13	14	15	12	19	10	11	8	5	6	7	4	1	2	3

小点群 D_4 的元素为 $\alpha_1 = e$，$\alpha_2 = C_{100}(\pi)$，$\alpha_3 = C_{010}(\pi)$，$\alpha_4 = C_{001}(\pi)$，$\alpha_{13} = C_{\bar{1}10}(\pi)$，$\alpha_{14} = C_{001}(\frac{\pi}{2})$，$\alpha_{15} = C_{001}(\frac{3\pi}{2})$，$\alpha_{16} = C_{110}(\pi)$. 利用这些符号小群的陪集为

$$\{O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)},\ \{\alpha_5|\mathbf{0}\}\cdot O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)},\ \{\alpha_9|\mathbf{0}\}\cdot O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}\}$$

以 Σ_1，Σ_2，Σ_3 分别代表三个陪集，它们为

$$O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)} = \Sigma_1 = D_4$$

$$O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)} = \Sigma_1 = [\{\alpha_1 | \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_2 | \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_3 | \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_4 | \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{13} | \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{15} | \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{18} | \mathbf{0}\}]\cdot T_{O_m}$$

$$\{\alpha_5 \mid \mathbf{0}\} \otimes O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)} = \Sigma_2 = [\{\alpha_5 \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_6 \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_7 \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_8 \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{17} \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{18} \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{19} \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{20} \mid \mathbf{0}\}] \cdot T_{O_m}$$

$$\{\alpha_9 \mid \mathbf{0}\} \otimes O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)} = \Sigma_3 = [\{\alpha_9 \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_10 \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{11} \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{12} \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{22} \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{23} \mid \mathbf{0}\} \oplus \{\alpha_{24} \mid \mathbf{0}\}] \cdot T_O$$

利用 O 群乘法表计算出 $\{\alpha_i|\mathbf{0}\}\otimes\Sigma_j$ 的结果，由这些表就可求出基础表示的表示矩阵. 把 $\{\alpha_k|\mathbf{0}\}\cdot\Sigma_i=\Sigma_j$ 简记为 $\alpha_k\cdot\Sigma_i=\Sigma_j$. 下表中列出计算结果. 其中第1、第2两个表给出了 $\alpha_i\Sigma_1$ 的结果. 比如 $\alpha_4\Sigma_1=\Sigma_1$ 等等，第一行 α_j 下的 Σ_j 表示 $\alpha_j\Sigma_1=\Sigma_j$，其余4个表分别给出了 $\alpha_i\Sigma_2=\Sigma_k$，$\alpha_i\Sigma_3=\Sigma_l$.

α_i	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	α_9	α_{10}	α_{11}	α_{12}
$\alpha_i\Sigma_1$	Σ_3	Σ_1	Σ_1	Σ_1	Σ_2	Σ_2	Σ_2	Σ_2	Σ_3	Σ_3	Σ_3	Σ_3
α_i	α_{13}	α_{14}	α_{15}	α_{16}	α_{17}	α_{18}	α_{19}	α_{20}	α_{21}	α_{22}	α_{23}	α_{24}
$\alpha_i\Sigma_1$	Σ_1	Σ_1	Σ_1	Σ_1	Σ_2	Σ_2	Σ_2	Σ_2	Σ_3	Σ_3	Σ_3	Σ_3

	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	α_9	α_{10}	α_{11}	α_{12}
$\alpha_i\Sigma_2$	Σ_2	Σ_2	Σ_2	Σ_2	Σ_3	Σ_3	Σ_3	Σ_3	Σ_1	Σ_1	Σ_1	Σ_1
α_i	α_{13}	α_{14}	α_{15}	α_{16}	α_{17}	α_{18}	α_{19}	α_{20}	α_{21}	α_{22}	α_{23}	α_{24}
$\alpha_i\Sigma_2$	Σ_3	Σ_3	Σ_3	Σ_3	Σ_1	Σ_1	Σ_1	Σ_1	Σ_2	Σ_2	Σ_2	Σ_2

α_i	α_1	α_3	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	α_9	α_{10}	α_{11}	α_{12}
$\alpha_i\Sigma_3$	Σ_3	Σ_3	Σ_3	Σ_3	Σ_1	Σ_1	Σ_1	Σ_1	Σ_2	Σ_2	Σ_2	Σ_2
α_i	α_{13}	α_{14}	α_{15}	α_{16}	α_{17}	α_{18}	α_{19}	α_{20}	α_{21}	α_{22}	α_{23}	α_{24}
$\alpha_i\Sigma_3$	Σ_2	Σ_2	Σ_2	Σ_2	Σ_3	Σ_3	Σ_3	Σ_3	Σ_1	Σ_1	Σ_1	Σ_1

由这些结果可得到基础表示矩阵为

$$\hat{O}^{3d}(\{\alpha_1 \mid \mathbf{0}\}) = \hat{O}^{3d}(\{\alpha_2 \mid \mathbf{0}\})$$

$$= \hat{O}^{3d}(\{\alpha_3 \mid \mathbf{0}\}) = \hat{O}^{3d}(\{\alpha_4 \mid \mathbf{0}\}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{O}^{3d}(\{\alpha_5 \mid \mathbf{0}\}) = \hat{O}^{3d}(\{\alpha_6 \mid \mathbf{0}\})$$

$$= \hat{O}^{3d}(\{\alpha_7 \mid \mathbf{0}\}) = \hat{O}^{3d}(\{\alpha_8 \mid \mathbf{0}\}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{O}^{3d}(\{\alpha_9 \mid \mathbf{0}\}) = \hat{O}^{3d}(\{\alpha_{10} \mid \mathbf{0}\})$$

$$= \hat{O}^{3d}(\{\alpha_{11} \mid \mathbf{0}\}) = \hat{O}^{3d}(\{\alpha_{12} \mid \mathbf{0}\}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{13} \mid \mathbf{0}\}) = \hat{O}^{3d}(\{\alpha_{14} \mid \mathbf{0}\})$$

$$=\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{15}\mid \mathbf{0}\})=\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{16}\mid \mathbf{0}\})=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$$

$$\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{17}\mid \mathbf{0}\})=\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{18}\mid \mathbf{0}\})$$

$$=\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{19}\mid \mathbf{0}\})=\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{20}\mid \mathbf{0}\})=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{21}\mid \mathbf{0}\})=\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{22}\mid \mathbf{0}\})$$

$$=\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{23}\mid \mathbf{0}\})=\hat{O}^{3d}(\{\alpha_{24}\mid \mathbf{0}\})=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}$$

有了基础表示，就可由(6.4.9)式得到由允许小表示 $\hat{O}^{3\Gamma}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}(\{\alpha_k|\mathbf{0}\})$，($\Gamma=A_1$，$A_2$，$B_1$，$B_2$，$E$)诱导出的空间群 O^3 的不可约表示，即

$$\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha\mid \boldsymbol{R}_n\})_{i\alpha,j\beta}$$
$$=\hat{O}^{3d}(\{\alpha\mid \boldsymbol{R}_n\})_{ij}\cdot\hat{O}^{3\Gamma}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}(\{\alpha_j\mid \mathbf{0}\}(\{\alpha\mid \boldsymbol{R}_n\}))_{\beta\alpha}\tag{6.5.4}$$

式中 X^* 代表 $\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$ 的星 $X^*=\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)^*=\{\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$，$\boldsymbol{k}_2=\alpha_5\boldsymbol{k}_1$，$\boldsymbol{k}_2=\alpha_9\boldsymbol{k}_1\}$，与元素 $\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\}$ 相应对的 $\{\alpha_j|\mathbf{0}\}(\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\})$ 由(6.4.6)定义，即

$$\{\alpha_j\mid \mathbf{0}\}(\{\alpha\mid \boldsymbol{R}_n\})=\{\alpha^i\mid \mathbf{0}\}^{-1}\cdot\{\alpha\mid \boldsymbol{R}_n\}\cdot\{\alpha_j\mid \mathbf{0}\}$$
$$=\{(\alpha^i)^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha^j\mid (\alpha^i)^{-1}\boldsymbol{R}_n\}\tag{6.5.5}$$

其中

$$\alpha_j(\alpha)=(\alpha^i)^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha_j\in D_4,$$
$$i,j=1,2,3,\quad \alpha^1=e,\quad \alpha^2=\alpha_5,\quad \alpha^3=\alpha_9$$

按定义

$$\alpha_1^1=(\alpha^1)^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha^1=\alpha$$
$$\alpha_2^1=e\cdot\alpha\cdot\alpha_5=\alpha\cdot\alpha_5$$
$$\alpha_3^1=e\cdot\alpha\cdot\alpha_9=\alpha\cdot\alpha_9$$
$$\alpha_1^2=(\alpha^2)^{-1}\cdot\alpha\cdot e=\alpha_9\cdot\alpha$$
$$\alpha_2^2=(\alpha^2)^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha_5=\alpha_9\cdot\alpha\cdot\alpha_5,$$
$$\alpha_3^2=(\alpha^2)^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha_9=\alpha_9\cdot\alpha\cdot\alpha_9$$
$$\alpha_1^3=(\alpha^3)^{-1}\cdot\alpha\cdot e=\alpha_5\cdot\alpha$$
$$\alpha_2^3=(\alpha^3)^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha_5=\alpha_5\cdot\alpha\cdot\alpha_5$$
$$\alpha_3^3=(\alpha^3)^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha_9=\alpha_5\cdot\alpha\cdot\alpha_9$$

在下面列出了 $\alpha_j(\alpha)$ 的对应表.

$\alpha_j(\alpha)$ \ α	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7	α_8	α_9	α_{10}	α_{11}	α_{12}	α_{13}	α_{14}	α_{15}	α_{16}	α_{17}	α_{18}	α_{19}	α_{20}	α_{21}	α_{22}	α_{23}	α_{24}
α_1^1	α_1	α_2	α_3	α_4									α_{13}	α_{14}	α_{15}	α_{16}								
α_2^1									α_1	α_2	α_3	α_4					α_{13}	α_{14}	α_{15}	α_{16}				
α_3^1					α_1	α_2	α_3	α_4													α_{13}	α_{14}	α_{15}	α_{16}
α_1^2					α_1	α_3	α_4	α_2									α_{13}	α_{16}	α_{15}	α_{14}				
α_2^2	α_1	α_3	α_4	α_2																	α_{13}	α_{15}	α_{16}	α_{14}
α_3^2									α_1	α_3	α_4	α_2	α_{13}	α_{15}	α_{16}	α_{14}								
α_1^3									α_1	α_4	α_2	α_3									α_{13}	α_{14}	α_{16}	α_{15}
α_2^3					α_1	α_4	α_2	α_3					α_{13}	α_{16}	α_{14}	α_{15}								
α_3^3	α_1	α_4	α_2	α_3													α_{13}	α_{16}	α_{14}	α_{15}				

在上表中只列出了基础表示非零矩阵元 $O_{ij}^{3d}\neq 0$ 中出现的 $\alpha_j^i(\alpha)$，只有这些 $\alpha_j^i(\alpha)$ 才在诱导表示中出现.

简单空间群 O^3 的小群 $O^3_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}$ 的允许小表示，由(6.4.21)式给出为

$$\hat{O}^{3\Gamma}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}(\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{R}_n}D_4^\Gamma(\alpha) \tag{6.5.6}$$

这样利用上面 $\alpha_j^i(\alpha)$ 表和(6.5.4)式就可得到空间群的不可约表示了. 把(6.5.5)式代入(6.5.4)式，得到

$$\begin{aligned}\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\})_{i\alpha,j\beta} &= \hat{O}^{3d}(\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\})_{ij}\hat{O}^{3\Gamma}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)}(\{(\alpha^i)^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha^j|(\alpha^i)^{-1}\boldsymbol{R}_n\})_{\alpha\beta}\\ &= \hat{O}^{3d}(\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\})_{ij}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_1\cdot(\alpha^i)^{-1}\boldsymbol{R}_n}D_4^\Gamma(\alpha^{ij}(\alpha))_{\alpha\beta}\\ &= \hat{O}^{3d}(\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\})_{ij}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{R}_n}D_4^\Gamma(\alpha^{ij}(\alpha))_{\alpha\beta}\end{aligned} \tag{6.5.7}$$

上述矩阵实际上是超矩阵，即每一个矩阵元 ij 为一个 $\lambda(\Gamma)$ 阶的矩阵 $\lambda(\Gamma)$ 为 D_4 群不可约表示 Γ 的阶数，因而(6.5.7)式也可写为

$$\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\})_{ij} = \hat{O}^{3d}(\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\})_{ij}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{R}_n}D_4^\Gamma(\alpha^{ij}(\alpha)) \tag{6.5.8}$$

当 $\alpha=\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ 时，表示矩阵为

$$\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha|\boldsymbol{R}_n\}) = \begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{R}_n}D_4^\Gamma(\alpha^{11}(\alpha)) & & \\ & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{R}_n}D_4^\Gamma(\alpha^{22}(\alpha)) & \\ & & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{R}_n}D_4^\Gamma(\alpha^{33}(\alpha))\end{pmatrix}$$

具体写出为

$$\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha_1|\boldsymbol{R}_n\}) = \begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{R}_n}I & & \\ & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{R}_n}I & \\ & & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{R}_n}I\end{pmatrix}$$

I 为 $\hat{D}_4^\Gamma(e)=I$，为 $\lambda(\Gamma)$ 维的单位矩阵.

$$\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha_2|R_n\})=\begin{pmatrix} e^{-ik_1\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_2) & & \\ & e^{-ik_2\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_3) & \\ & & e^{-ik_2\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_4) \end{pmatrix}$$

$$\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha_3|R_n\})=\begin{pmatrix} e^{-ik_1\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_3) & & \\ & e^{-ik_2\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_4) & \\ & & e^{-ik_2\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_2) \end{pmatrix}$$

$$\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha_4|R_n\})=\begin{pmatrix} e^{-ik_1\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_4) & & \\ & e^{-ik_2\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_2) & \\ & & e^{-ik_2\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_3) \end{pmatrix}$$

其它元$\{\alpha_i|R_n\}$的表示矩阵也可类似地写出，比如

$$\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha_5|R_n\})=\begin{pmatrix} & & e^{-ik_1\cdot R_n}I \\ e^{-ik_2\cdot R_n}I & & \\ & e^{-ik_2\cdot R_n}I & \end{pmatrix}$$

$$\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha_6|R_n\})=\begin{pmatrix} & & e^{-ik_1\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_2) \\ e^{-ik_2\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_3) & & \\ & e^{-ik_2\cdot R_n}D_4^\Gamma(\alpha_4) & \end{pmatrix}$$

$$\hat{O}^{3\Gamma(X^*)}(\{\alpha_9|R_n\})=\begin{pmatrix} & e^{-ik_1\cdot R_n}I & \\ & & e^{-ik_2\cdot R_n}I \\ e^{-ik_2\cdot R_n}I & & \end{pmatrix}$$

利用这种方法可构造出各种对称性 k^* 的不可约表示.

3. 空间群 O^3 的一般 k 点的不可约表示 $O^{3(k^*)}$

对于一般 k，不可约表示 $O^{3(k^*)}$归结为寻求小商群 $k^3/T_{O_k}\sim O$ 的正则表示. 对于简单空间群 O^3，正则表示矩阵元的表示式(6.4.48)变为

$$\hat{O}^L(\{\alpha|\mathbf{0}\})_{ij}=\begin{cases}1, & \{\alpha|\mathbf{0}\}\cdot\{\alpha_j|\mathbf{0}\}=\{\alpha_i|\mathbf{0}\}\\ 0, & 其它\end{cases} \tag{6.5.9}$$

于是得到不可约表示

$$\hat{O}^{3(k^*)}(\{\alpha|R_n\})_{ij}=\hat{O}^L\cdot(\{\alpha|\mathbf{0}\})_{ij}\cdot e^{-ik\cdot(\alpha^{ij}R_n)} \tag{6.5.10}$$

其中 α^{ij}由(6.5.9)式决定，即

$$\begin{aligned}\{\alpha^{ij}|\mathbf{0}\}(\{\alpha|R_n\}) &= \{\alpha_i|\mathbf{0}\}^{-1}\cdot\{\alpha|R_n\}\cdot\{\alpha_j|\mathbf{0}\}\\ &=\{\alpha_i^{-1}\cdot\alpha\cdot\alpha_j|\alpha_i^{-1}R_n\}=\{e|\alpha_i^{-1}R_n\}\end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned}\hat{O}^{3(k^*)}(\{\alpha|R_n\}) &= \hat{O}^L\cdot(\{\alpha|\mathbf{0}\})_{ij}\cdot e^{-ik\cdot(\alpha_i^{-1}R_n)}\\ &=\hat{O}^L(\{\alpha|\mathbf{0}\})_{ij}\cdot e^{-ik_i\cdot R_n}\end{aligned} \tag{6.5.11}$$

$\alpha_i k = k_i$.

比如对群元素$\{e|\boldsymbol{R}_n\}$，正则表示的矩阵为单位矩阵，即

$$\hat{O}^L(\{e|\boldsymbol{R}_n\})_{ij}=\delta_{ij}$$

则不可约表示为 24 阶的矩阵.

$$\hat{O}^{3(k^*)}(\{e|\boldsymbol{R}_n\})=\begin{pmatrix} e^{-ik\cdot R_n} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & e^{-ik_m\cdot R_n} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & e^{-ik_{24}\cdot R_n}\end{pmatrix}$$

对于 $\alpha_i=\alpha_2$，由 $\alpha_i\cdot\alpha_2=\alpha_j$ 可得到正则表示矩阵 $\hat{O}^L(\{\alpha_2|\boldsymbol{0}\})$的矩阵元为：

$$\begin{array}{lllll}
\hat{O}^L_{1j}=\delta_{j2} & \hat{O}^L_{2j}=\delta_{j1} & \hat{O}^L_{3j}=\delta_{j4} & \hat{O}^L_{4j}=\delta_{j3} & \hat{O}^L_{5j}=\delta_{j6} \\
\hat{O}^L_{6j}=\delta_{j5} & \hat{O}^L_{7j}=\delta_{j8} & \hat{O}^L_{8j}=\delta_{j7} & \hat{O}^L_{9j}=\delta_{j,10} & \hat{O}^L_{10,j}=\delta_{j,9} \\
\hat{O}^L_{11,j}=\delta_{j,12} & \hat{O}^L_{12,j}=\delta_{j,11} & \hat{O}^L_{13,j}=\delta_{j,14} & \hat{O}^L_{14,j}=\delta_{j,13} & \hat{O}^L_{15,j}=\delta_{j,16} \\
\hat{O}^L_{16,j}=\delta_{j,15} & \hat{O}^L_{17,j}=\delta_{j,18} & \hat{O}^L_{18,j}=\delta_{j,17} & \hat{O}^L_{19,j}=\delta_{j,20} & \hat{O}^L_{20,j}=\delta_{j,19} \\
\hat{O}^L_{21,j}=\delta_{j,22} & \hat{O}^L_{22,j}=\delta_{j,21} & \hat{O}^L_{23,j}=\delta_{j,24} & \hat{O}^L_{24,j}=\delta_{j,23} &
\end{array}$$

在上述各个矩阵元中略去了群元素$\{\alpha_2|\boldsymbol{R}_n\}$.

因而得到元素$\{\alpha_2|\boldsymbol{R}_n\}$的不可约表示矩阵为

$$\hat{O}^{3(k^*)}(\{\alpha_2|\boldsymbol{R}_n\})$$

$$=\begin{pmatrix}
0 & e^{-ik\cdot R_n} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
e^{-ik_i\cdot R_n} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & e^{-ik_3\cdot R_n} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & e^{-ik_{22}\cdot R_n} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & e^{-ik_{23}\cdot R_n} \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & e^{-ik_{24}\cdot R_n} & 0
\end{pmatrix}$$

6.5.2　空间群 O_h^5 的不可约表示

空间群 O_h^5 国际符号为(Fm3n)，第五章中已指出它是空间群 O^3 与空间反演 $I=\{e,i\}$的直积，即

$$O_h^5=O^3\otimes I=O^3\oplus\{i|(0,0,0)\}\otimes O^3$$

反演群只有两个一维的不可约表示：

I	e	i
g	1	1
u	1	-1

因而由第一章讨论的直积群的表示理论给出可由 O^3 群的不可约表示得到 O_h^5 群的不可约表示.

如果 $\hat{O}^{3\Gamma(k^*)}(\{\alpha_i|\boldsymbol{R}_n\})$是空间群 O^3 的不可约表示，则空间群 O_h^5 的不可约表示为 $\hat{O}_h^{5\Gamma g(k^*)}$ 和 $\hat{O}_h^{5\Gamma u(k^*)}$，它们的表示矩阵为

$$\begin{cases} \hat{O}^{5\Gamma_g(k^*)}(\{\alpha_i \mid \boldsymbol{R}_n\}) = \hat{O}^{3\Gamma(k^*)}(\{\alpha_i \mid \boldsymbol{R}_n\}) \\ \hat{O}^{5\Gamma_g(k^*)}(\{\alpha_i \mid \boldsymbol{R}_n\}\{i \mid (0,0,0)\}) = \hat{O}^{3\Gamma(k^*)}(\{\alpha_i \mid \boldsymbol{R}_n\}) \\ \hat{O}^{5\Gamma_u(k^*)}(\{\alpha_i \mid \boldsymbol{R}_n\}) = \hat{O}^{3\Gamma(k^*)}(\{\alpha_i \mid \boldsymbol{R}_n\}) \\ \hat{O}^{5\Gamma_u(k^*)}(\{\alpha_i \mid \boldsymbol{R}_n\}) = \hat{O}^{3\Gamma(k^*)}(\{\alpha_i \mid \boldsymbol{R}_n\}\{i \mid (0,0,3)\}) \end{cases} \tag{6.5.12}$$

不可约表示 Γ_g 是正宇称的表示，Γ_u 为负宇称的表示.

6.5.3 空间群 O^2 与 O_h^3 的不可约表示

空间群 O^2 国际符号为($P4_232$)，是非简单空间群，在第五章已给出它的结构为

$$O^2 = T^1 + \{\alpha_{13} | (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\} \otimes T^1 \tag{6.5.13}$$

T^1 是简单空间群，国际符号为($P23$). 立方系 O_h 类空间群 T^k，T_d^k，T_h^k，O^k，O_h^k 都有相同的 Bravairs 点阵和相同的平移群，T^1 按平移群 T_{O_h}的陪集展开为

$$T^1 = \sum_{\alpha_i \in T} \oplus \{\alpha_i \mid \boldsymbol{0}\} \cdot T_{O_h}$$

因而(6.5.13)式为

$$O^2 = \sum_{\alpha_i \in T} \oplus \{\alpha_i \mid \boldsymbol{0}\} \cdot T_{O_h} + \sum_{\alpha_i \in T} \{\alpha_{13} \mid (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\} \cdot \{\alpha_i \mid \boldsymbol{0}\} T_{O_h} \tag{6.5.14}$$

而 T 群的点操作为 α_1，α_2，…，α_{12}，由 O 群元素乘法表可得到 $\alpha_{13} \cdot \alpha_i = \alpha_k$. 当 $i \leqslant 12$ 时，$k \geqslant 13$，因而

$$\{\alpha_{13} | (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\} \cdot \{\alpha_i | \boldsymbol{0}\} = \{\alpha_{13}\alpha_i | (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\} = \{\alpha_k | (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\}$$

于是上面 O^2 群的陪集展开式为

$$O^2 = \sum_{i \leqslant 12} \oplus \{\alpha_i \mid \boldsymbol{0}\} \cdot T_{O_h} \oplus \sum_{i > 12} \oplus \{\alpha_i \mid (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\} \cdot T_{O_h} \tag{6.5.15}$$

这说明空间群 O^2 是一非简单空间群，存在螺旋轴，点子群为 T 群.

非简单空间群只有第一 Brillouin 区边界上的波矢 $\boldsymbol{k}^*$ 所描述的不可约表示才与简单空间群有所不同，因而下面对 Brillouin 区边界上的 X 点所标记的不可约表示进行讨论.

空间群 O^2 的点阵具有简单立方型，因而 Brillouin 区如图 6.1.1 所示. 边界上的 X 点，$\boldsymbol{k}_1 = \frac{1}{2}\boldsymbol{b}_3 = (0, 0, \frac{1}{2})$，容易看到使 $\alpha_i\boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_m$ 的集合$\{\alpha_i\}$为 D_4 群，即元素集合 $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_{13}, \alpha_{14}, \alpha_{15}, \alpha_{16}\}$. 相应的星也是 $\boldsymbol{k}_1{}^* = \{\boldsymbol{k}_1, \alpha_5\boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{k}_2, \alpha_9\boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{k}_3\}$. 小商群 O^2/T_{O_h}同构于小点群 D_4，即

$$O^2/T_{O_h} \sim D_4$$

以 D_4 群描述小商群，即

$$O^2/T_{O_h}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_{O_h})=D_4(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_{O_h}),\quad \alpha_i\in D_4$$

$\alpha_i=\alpha_1$，α_2，α_3，α_4，陪集代表元素为$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}=\{\alpha_i|(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})\}$，$\alpha_i=\alpha_{13}$，$\alpha_{14}$，$\alpha_{15}$，$\alpha_{16}$陪集代表元素为$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}=\{\alpha_1|(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})\}$.

空间群 O^2 对 X 点标记的小群 $O^2_{(0,0,\frac{1}{2})}$ 的陪集展开为

$$O^2=O^2_{(0,0,\frac{1}{2})}\oplus\{\alpha_5|\boldsymbol{0}\}\cdot O^2_{(0,0,\frac{1}{2})}\oplus\{\alpha_9|\boldsymbol{0}\}O^2_{(0,0,\frac{1}{2})}$$

因而与上节讨论的 O^3 群具有相同的基础表示结构，不可约表示 $O^{2\Gamma(X^*)}$ 也由(6.5.4)式描述，即

$$\begin{aligned}&\hat{O}^{2\Gamma(X^*)}(\{\alpha\mid \boldsymbol{t}+\boldsymbol{R}_n\})\\&=\hat{O}^{2d}(\{\alpha\mid \boldsymbol{t}+\boldsymbol{R}_n\})_{ij}\hat{O}^{2\Gamma}_{(0,0,\frac{1}{2})}(\{\alpha^i_j(\alpha)\mid(\alpha^i)^{-1}(\boldsymbol{t}+\boldsymbol{R}_n)\})_\alpha\end{aligned}\tag{6.5.16}$$

对于非简单空间群 Brillouin 区边界上 $\boldsymbol{k}$，允许小表示由定理6.4.6给出，对于 O^2 为

$$\hat{O}^{2\Gamma}_{(0,0,\frac{1}{2})}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}_i}\check{D}^{\Gamma}_4(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_{O_h})\tag{6.5.17}$$

其中 $\check{D}^{\Gamma}_4$ 为小商群 D_4 的投影表示.

根据定理6.4.5，如果 $\check{D}^{\Gamma}_4(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_{O_h})$是小商群 $O^2_{(0,0,\frac{1}{2})}/T_{O_h}\sim D_4$ 的不可约表示，则

$$\check{D}^{\Gamma}_4(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_{O_h})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}_i}\hat{D}^{\Gamma}_4(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_{O_h})\tag{6.5.18}$$

是小商群 D_4 的投影表示. 由于非基本平移

$$\boldsymbol{t}_i=\begin{cases}\boldsymbol{0}, & i\leqslant 12,\ i=1,2,3,4\\(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}), & i>12,\ i=13,14,15,16\end{cases}$$

因而

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}_j}&=\begin{cases}1\\\exp\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{1}{2}\boldsymbol{b}_3}\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_1+\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2+\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_3\right)\right\}\end{cases}\\&=\begin{cases}1, & j=1,2,3,4\\i, & j=13,14,15,16\end{cases}\end{aligned}$$

这表明小群 $O^2_{(0,0,\frac{1}{2})}$的允许小表示 $\hat{O}^{\Gamma}_4(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\}\cdot T_{O_h})$，当 $i=1,2,3,4$ 时，即为投影表示的表示矩阵，而对 $i=13,14,15,16$ 乘以 i 就得到了相应的投影表示的表示矩阵. 这样就可由(6.5.10)得到了空间群 O^2 的不可约表示.

与上节相比较，O^2 群的不可约表示$\{X^*\}$与 O^3 群相应的不可约表示有相同的矩阵结构，只是对于 $\alpha_i=\alpha_{13}$，α_{14}，α_{15}，α_{16}的小群允许表示的表示矩阵乘以 i. 因而可由上节的结果把允许小表示改造为投影表示就得到 O^2 群的不可约表示.

空间群 O^5_h 国际符号为$(Pm3n)$，是一直积群，

$$O^5_h=O^2\oplus\{\alpha_{25}|(0,0,0)\}\otimes O^2$$

因而可在已经得到 O^2 群不可约表示基础上，得到与(6.5.11)式相似的 O_h^5 群的不可约表示.

6.6 空间群表示理论对晶体能带理论的应用

晶体的理想模型或者称为理想晶体，认为构成晶体的原子严格分布在一定空间点阵的格点上，因而理想晶体具有一定空间群的对称性.

比如 GaAs 晶体是一种重要的半导体材料，它的理想结构是 Ga 原子分布在一套面心点阵的格点上，As 原子分布在另一套面心点阵的结点上，两套面心点阵具有相同晶格常数 a. 两套点阵(或称晶格)套叠在一起，沿立方晶格对角线移动$\frac{1}{4}a$，就成了 GaAs 的晶体点阵. 这种由两种离子构成的理想晶体具有简单空间群 $T_d^2(F\bar{4}3m)$ 的对称性.

又如 Ge 单晶也是一种重要半导体材料，Ge 原子除严格分布在面心立方点阵格点 $\boldsymbol{R}_n$ 之外，在点阵空间的非格点

$$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{R}_n+\boldsymbol{t},\quad \boldsymbol{t}=\frac{a}{4}(1,1,1)$$

上分布一个 Ge 原子，因而它具有空间群 $O_h^7(Fm3m)$ 的对称性. O_h^7 是非简单空间群，非基本平移为 $\boldsymbol{t}=\frac{a}{4}(1,1,1)$，它的平移群陪集展开为

$$O_h^7=\sum_{\alpha_i\in O}\oplus\{\alpha_i\mid \boldsymbol{0}\}\cdot T_{O_h}\oplus\sum_{\alpha_i\in O}\oplus\{\alpha_i I\mid \boldsymbol{t}\}\cdot T_{O_h}$$

总之，每一种理想晶体都具有某种空间群的空间对称性.

晶体中的电子可分为两大类. 构成晶体的原子的内壳层电子，主要是受原子核的作用和内壳层电子间的相互作用，晶体环境对它们的作用是次要的，仅是一种微扰. 因而，内壳层电子还是定域在原子核附近运动. 另一类是原子外壳层的电子，由于晶体环境的作用，它们在整个晶体中运动，变为晶体的公有化电子. 而决定晶体物理性质的(主要是电学，磁学和光学性质)是这些公有化电子. 在忽略自旋作用后可认为公有化电子受晶体环境的平均作用，用势能函数 $V(\boldsymbol{r})$ 描述晶体中电子的平均势能. 这就得到了所谓单电子近似. 在单电子近似下，晶体公有化电子的 Schrodinger 方程为

$$H\Psi=E\Psi \tag{6.6.1}$$

晶体哈密顿算子 H 为

$$H=-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r}) \tag{6.6.2}$$

由于晶体的空间群对称性，势能函数 $V(\boldsymbol{r})$ 具有晶体所属空间群的对称性，从而哈密顿算子 H 也有空间群的对称性，即

$$[\hat{P}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i+\boldsymbol{R}_n\}),H]=0$$

其中 $\hat{P}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i+\boldsymbol{R}_n\})$ 是空间群的算子，$\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i+\boldsymbol{R}_n\}$ 为空间群的元素. 因而空间群不可约表示理论与求解单电子近似下晶体中公有化电子的 Schrodinger 方程有十分密切的联系.

由于晶体电子哈密顿(6.6.2)式具有晶体所属空间群 G^P 的对称性，因而也具有空间群 G^P 的平移子群 T_G 的对称性，在单电子近似下的晶体公有化电子的 Schrodinger 方程的本征函数一定为 Bloch 函数，即

$$\Psi_k(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}U(\boldsymbol{r}) \tag{6.6.3}$$

把它代入方程(6.6.2)得到波函数中的 $U(\boldsymbol{r})$ 所满足的方程为

$$\left[-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})-\mathrm{i}\frac{h^2}{m}\boldsymbol{k}\cdot\nabla+\frac{h^2k^2}{2m}\right]U(\boldsymbol{r})=E(\boldsymbol{k})U(\boldsymbol{r}) \tag{6.6.4}$$

能量本征值 E 为波矢 $\boldsymbol{k}$ 的函数. 对于一定波矢 $\boldsymbol{k}$ 求解方程(6.6.4)可得到一系列解：

$$E_1(\boldsymbol{k}):\ \Psi_{1k}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}U_1(\boldsymbol{r}),$$

$$E_2(\boldsymbol{k}):\ \Psi_{2k}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}U_2(\boldsymbol{r}),$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$E_n(\boldsymbol{k}):\ \Psi_{nk}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}U_n(\boldsymbol{r}),$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

第一 Brillouin 区中有 $N=N_1N_2N_3$ 个波矢 $\boldsymbol{k}$，因而当 $\boldsymbol{k}$ 在 N 个波矢向量中准连续变化时，能量本征值 $E_n(\boldsymbol{k})$ 也准连续变化，这 N 个准连续变化的能级就形成了一个能带，而标记这一能带的 n 是另一个必要的量子数.

由于 Schrodinger 方程(6.6.1)具有空间群 G^P 的对称性，容易得到能量本征值 $E_n(\boldsymbol{k})$ 对 $\boldsymbol{k}$ 具有对称性.

(1) $E(\boldsymbol{k})$ 具有对称性：

$$E_n(\boldsymbol{k})=E_n(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m)$$

前面已指出，对于一定 $\boldsymbol{k}$ 的小点群 $G(\boldsymbol{k})$，波矢 $\boldsymbol{k}$ 具有性质

$$\alpha_i\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_{m_i},\qquad \alpha_i\in G(\boldsymbol{k})$$

$\boldsymbol{k}_{m_i}$ 为倒易点阵的格点. 由于空间群 G^P 的算子 $\hat{P}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})$ 与 H 交换，如果 $\Psi_{nk}(\boldsymbol{r})$ 是本征值为 $E_n(\boldsymbol{k})$ 的本征函数，即

$$H\Psi_{nk}(\boldsymbol{r})=E_n(\boldsymbol{k})\Psi_{nk}(\boldsymbol{r})$$

则 $\hat{P}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})\Psi_{nk}(\boldsymbol{r})$ 也是相同本征值 $E(\boldsymbol{k})$ 的本征函数.

如果 $\alpha_i\in G(\boldsymbol{k})$，由(6.2.11)式得到

$$\hat{P}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})\Psi_{n,k}(\boldsymbol{r})=\Psi'_{n\alpha_ik}(\boldsymbol{r})=\Psi'_{n,k+k_m}(\boldsymbol{r})$$

即 $\hat{P}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})\Psi_{n,k}(\boldsymbol{r})$ 为以 $\alpha_i^{-1}\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m$ 标记的另一个 Bloch 函数，这个 Bloch 函数对应相同的能量本征值，即 $E_n(\boldsymbol{k})=E_n(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_m)$.

(2) 波矢 $\boldsymbol{k}$ 的星 $\{\boldsymbol{k}^*\}=\{\boldsymbol{k},\ \alpha_2\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_2,\ \cdots,\ \alpha_{n(s)}\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_{n(s)}\}$ 中 $(n(s))$ 个波矢所标记的 Bloch 函数 $\Psi_{n,k_i}(\boldsymbol{r})$ 有相同的能量，即

$$E_n(\boldsymbol{k})=E_n(\alpha_i\boldsymbol{k}),\qquad \alpha_i\in G(\boldsymbol{k})$$

这一点也可证明. 上面已指出 $\Psi_{n,k}(\boldsymbol{r})$ 与 $\hat{P}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})\Psi_{n,k}(\boldsymbol{r})$ 属于共同本征值 $E_n(\boldsymbol{k})$ 的本征函数，另一方面，若 $\alpha_i\in S(k)$，即

$$\hat{P}(\{\alpha_i|\boldsymbol{t}_i\})\Psi_{n,k}(\boldsymbol{r})=\Psi_{n,k'}(\boldsymbol{r}),\qquad \alpha_i\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$$

$\boldsymbol{k}'$是$\boldsymbol{k}^*$中的一个波矢，因而$E_n(\boldsymbol{k})=E_n(\boldsymbol{k}')$.

由于 Schrodinger 方程(6.6.1)还具有时间反演对称性，即时间反演$\hat{k}_0$与H交换，而

$$\hat{k}_0\Psi_{n,\boldsymbol{k}}=\Psi^*_{n,\boldsymbol{k}}=\Psi_{n,-\boldsymbol{k}}$$

因而$\Psi_{n,\boldsymbol{k}}$与$\Psi_{n,-\boldsymbol{k}}$是相同本征值$E_n(\boldsymbol{k})$的本征态，于是得到$E_n(\boldsymbol{k})$的第三种对称性，即

$$E_n(\boldsymbol{k})=E_n(-\boldsymbol{k})$$

由上面讨论可看到，空间群的不可约表示的基矢是晶体 Schrodinger 方程的本征态，所对应的能量本征值$E_n(\boldsymbol{k})$是波矢向量的准连续函数，当$\boldsymbol{k}$在$N=N_1$，N_2，N_3个允许值中变化时，$E_n(\boldsymbol{k})$随之而变化，于是就由准连续变化的能级构成了能带. 不同的量子数n标记不同能带.

空间群G^P的一个不可约表示$G^{P\nu(\boldsymbol{k}^*)}$的所有基矢具有相同的本征值$E_n(\boldsymbol{k})$，表示的维数为$n(s)\cdot n_d$，$n(s)$是$\boldsymbol{k}$的星$\{\boldsymbol{k}^*\}$中$\boldsymbol{k}$的数目. n_d是小子群G_k^P的陪集的数目. 即$n(G)/n(G(\boldsymbol{k}))$. 因而，不同$\boldsymbol{k}$的能级$E_n(\boldsymbol{k})$的退化度是不同的. 没有任何对称性的一般$\boldsymbol{k}$，$n(G(\boldsymbol{k}))=1$，$n(s)=n(G)$. 因而,退化度为1. 对称性最高的$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$的$\Gamma$点. 退化度为$n(G)$. 其它对称点、对称线和对称面上的$\boldsymbol{k}$退化度由它的$n(s)$和$n(G(\boldsymbol{k}))$决定. 考虑到电子自旋，上述的退化度增一倍.

6.7 Shubnikov 群表示理论概要——共表示简介

在5.9节中介绍了 Shubnikov 点群G_s和 Shubnikov 空间群G_S^P(亦称磁点群和磁空间群)

它是由普通点群或空间群加入时间反演算子$\hat{K}_0$而构成. 与第二章讨论的第二类点群在结构相似，也分为两种类型，即

$$G_s=G\oplus\hat{K}_0\cdot G$$

$$G_s=H\oplus\hat{K}_0\cdot gH\sim G_j,\quad \bar{H}=G_j-H \tag{6.7.1}$$

G为点群或空间群，H是G的指数为2的不变群，$\bar{H}$是陪集求和.

但是它们的不可约表示却不能像第三章对第二类点群那样进行处理，因为时间反演算子$\hat{K}_0$不是酉算子，而是反酉算子.

所谓反酉算子$\hat{K}_0$，是指它对空间V中的矢量X和Y的线组合$(\alpha X+\beta Y)$的作用是反线性的，即

$$\hat{K}_0(\alpha X+\beta Y)=\alpha^*AX+\beta^*AY \tag{6.7.2}$$

而它对内积的作用为

$$(\hat{K}_0X,\ \hat{K}_0Y)=(X,\ Y)^*=(Y,\ X) \tag{6.7.3}$$

这两点均与酉算子不同，酉算子$\hat{P}$为

$$\hat{P}(\hat{P}X+\hat{P}Y)=\alpha PX+\beta\hat{P}Y\quad(线性算子)$$

$$(\hat{P}X,\ \hat{P}Y)=(X,\ Y)$$

n 阶 Shubnikov 群 G 实际上是由 $n/2$ 个酉元素 U_i，$i=1,2,\cdots,n/2$ 和 $n/2$ 个反酉元素 S_i，$i=1,2,\cdots,n/2$ 构成的群，而且

$$S_i \cdot S_j = U_k, \quad U_i \cdot U_j = U_k, \quad S_i \cdot U_j = S_l, \quad U_j \cdot S_i = S_p$$

这些群的封闭性保证了：若 S_i，S_j，U_i，$U_j \in G_s$，则 U_k，S_l，$S_p \in G_s$. 单位元 e 为酉元素，U_i 的逆 U_i^{-1} 是酉算子，S_i 的逆 S_i^{-1} 是反酉算子.

假定 m 维线性空间 V 是群 G_s 的不变空间，它的基矢为 $\{e_1, e_2, \cdots, e_m\}$，这个空间可荷载 G_s 的表示，即

$$U_i e_\alpha = \sum_\beta M_{\beta\alpha}(U_i) e_\beta, \quad S_i e_\alpha = \sum_\beta M_{\beta\alpha}(S_i) e_\beta \tag{6.7.4}$$

$M_{\beta\alpha}(U_i)$ 和 $M_{\beta\alpha}(S_i)$ 为群元素 U_i 和 S_i 的表示矩阵 $\hat{M}(U_i)$ 和 $\hat{M}(S_i)$.

对酉型元素 U_i 与 U_j 之积 $U_i \cdot U_j$ 和元素 U_i 与 S_j 之积 $U_i \cdot S_j$ 表示矩阵为

$$\begin{cases} \hat{M}(U_i \cdot U_j) = \hat{M}(U_i) \cdot \hat{M}(U_j)^* \\ \hat{M}(U_i \cdot S_j) = \hat{M}(U_i) \cdot \hat{M}(S_j)^* \end{cases} \tag{6.7.5}$$

而对元素之积 $S_i \cdot U_j$ 和 $S_i \cdot S_j$ 则不然，容易得到它们为

$$\begin{cases} \hat{M}(S_i \cdot U_j) = \hat{M}(S_i) \cdot \hat{M}(U_j) \\ \hat{M}(S_i \cdot S_j) = \hat{M}(S_i) \cdot \hat{M}(S_j) \end{cases} \tag{6.7.6}$$

称表示矩阵具有(6.7.5)和(6.7.6)的性质的包括反酉变换群的表示为共表示(Corepresentation).

Shubnikov 群的表示为共表示.

共表示理论是对第一章讨论的一般群的表示理论的推广，很多基本性质与第一章所讨论的表示理论都有所不同. 比如 Schur 引理，表示的广义正交定理都须进行推广. 本书对这些问题就不做进一步讨论了，有兴趣的读者可参阅有关文献. 如 Bradley C J and Davios B L 的论文"Magnetrc Groups and Their Corepresentations" Rev. Mod. Phys. 40, 359 (1968).

6.8　空间群表示理论小结

为了建立空间群的不可约表示，引入空间群 G^P 的重要的子群——小子群(或称小群) G_k^P. 这类子群是对波矢向量 $\boldsymbol{k}$ 定义的，它为

$$G_k^P = \{\{\alpha | \boldsymbol{t}\} | \alpha\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_m\}$$

对于满足条件 $\alpha\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_m$ 的点变换 α 集合，$\{\alpha | \alpha\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_m\}$ 构成点群 G 的子群 $G(\boldsymbol{k})$，称为小点群. 点群 G 按它的子群小点群进行陪集分解，得到

$$G = G(\boldsymbol{k}) \oplus \sum_i \alpha_i G(\boldsymbol{k})$$

其中 α_i 为陪集 $\alpha_i G(\boldsymbol{k})$ 的代表元素，共有 $n(s) = n(G)/n(G(\boldsymbol{k}))$ 个. 由它们得到的 $\boldsymbol{k}_i$ 为

$$\boldsymbol{k}_i = \alpha_i \boldsymbol{k}, \quad i = 1, 2, \cdots, n(s)$$

集合 $\{\boldsymbol{k}^*\} = \{\alpha_1\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_1, \alpha_2\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_2, \cdots, \alpha_{n(s)}\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_{n(s)}\}$ 称为波矢 $\boldsymbol{k}$ 的星，记为 $\{\boldsymbol{k}^*\}$.

空间群 G^P 的小子群 G_k^P 包括平移子群 T_{G_b}，因而

$$G_k^P = \sum_{\alpha \in G(k)} \oplus \{\alpha \mid t\} \cdot T_{G_b}, \quad t \text{ 为非基本平移或 } 0$$

根据诱导表示理论，由平移子群 T_{G_b} 可诱导出小群 G_k^P 的表示 $G_k^P(\uparrow T_{G_b})$. 这个表示一般是可约表示，它可分解为小子群的不可约表示的直和，即

$$G_k^P(\uparrow T_{G_b}) = \sum_{\nu} \oplus a_\nu G_k^{P(\nu)}$$

称在诱导表示 $G_k^P(\uparrow T_{G_b})$ 分解中出现的小子群的不可约表示 $G_k^{P(\nu)}$ 为允许小表示，允许小表示在空间群不可约表示中也是一个十分重要的概念.

在本章的有关定理中已证明了：

(1) 允许小表示维数的平方和等于小点群 $G(\boldsymbol{k})$ 的阶数或商群 G_k^P/T_{G_b} 的阶数.

(2) 由小群 G_k^P 的允许小表示 $G_k^{P(\nu)}$ 诱导出的空间群 G^P 的表示是不可约表示，这个不可约表示与 $\boldsymbol{k}$ 的星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 有关，记为 $G^{P(k^*)(\nu)}$.

(3) 不同允许小表示诱导出的空间群 G^P 的不可约表示是不等价的不可约表示.

(4) 由全部允许小表示诱导出了空间群 G^P 的全部不等价不可约表示，它们的维数平方和等于空间群 G^P 的阶数.

因而使用诱导表示方法建立空间群的不可约表示，就归结于寻求全部允许小表示. 这须分两种情况进行讨论. 对于 Brillouin 区内部的波矢向量 $\boldsymbol{k}$ 所定义的小群 G_k^P 或简单空间群的全部波矢 $\boldsymbol{k}$ 的允许小表示就是小点群 $G(\boldsymbol{k})$ 的不可约表示. 因而对简单空间群和非简单空间群 Brillouin 区内部 $\boldsymbol{k}$，允许小表示是完全知道的. 对于非简单空间群 Brillouin 区边界上的 $\boldsymbol{k}$，允许小表示可由小点群的投影表示得到，因而空间群的这类不可约表示涉及投影表示的问题.

允许小表示 $G_k^{P(\nu)}$ 表示空间为 $\Lambda^{(k)}$，它由 $n(\nu)$ 个 Bloch 函数集合 $\{\Psi_k^{(i)}(\boldsymbol{r}), i=1, 2, \cdots, n(\nu)\}$ 构成，因而空间群不可约表示 $G^{P(k^*)(\nu)}$ 的表示空间为

$$\Lambda_{(\nu)}^{(k^*)} = \Lambda_\nu^{(k)} \oplus \Lambda_\nu^{(\alpha k)} \oplus \cdots \oplus \Lambda_\nu^{(\alpha_{n(s)} k)}$$

因而空间群不可约表示空间的基矢均为 Bloch 函数.

第七章　置换群及其表示理论

本章将首先讨论置换群的概念以及置换的表示和置换群的共轭类，进而由置换的循环结构引人分割和 Young 图的重要概念，然后讨论置换群的表示理论. 由于置换群的一些表示理论的重要定理，如 Frobenius 定理，Yong-Yamanouchi 定理等,证明十分复杂，本书只介绍这些定理，而不给出证明. 在这些定理的基础上，讨论了置换群的特征标、标准表示和非标准 Young 表示，并简单讨论了置换群表示理论对 Fermi 子体系的应用.

7.1　置换群

7.1.1　置换群

由 n 个不可区分的对象构成的体系，由于这些对象相互间不可区分，因而对这 n 个对象进行任意置换，体系保持不变. 它们构成保持体系不变的一个群，称为置换群(permatation groups)，一般记为 S_n.

微观粒子，如电子、质子、中子等具有不可区分性，因而 n 个相同微观粒子构成的物理体系具有 n 个对象的置换群 S_n 的对称性.

用数字 1，2，3，…，n 代表 n 个对象，如果把 1 变为 i_1，2 变为 i_2，…，n 变为 i_n(i_1，i_2，…，i_n 是 1，2，3，…，n 中的一个数字，而且，它们中没有相同的)，称为一个置换，记为

$$P=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\end{pmatrix} \tag{7.1.1}$$

其中 i_1，i_2，i_3，…，i_n 为 1，2，3，…，n 的某一种排列，而 1，2，3，…，n 的所有可能排列的数目为 $n!$，因而 S_n 群的阶为 $n!$.

一个具体的置换，它所表示的是 $1\to i_1$，$2\to i_2$，…，$n\to i_n$，而(7.1.1)式中上一行 1，2，3，…，n 的排列顺序是任意的，因而

$$\begin{aligned}P&=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}1 & 3 & 6 & \cdots & n & \cdots & n-3\\ i_1 & i_3 & i_6 & \cdots & i_n & \cdots & i_{n-3}\end{pmatrix}\\ &=\cdots\end{aligned}$$

对这 n 个数字，先进行置换

$$P_1=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\end{pmatrix}$$

然后再进行置换

$$P_2=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ j_1 & j_2 & j_3 & \cdots & j_n\end{pmatrix}$$

也就是说先把 $1\to i_1$, $2\to i_2$, …, $n\to i_n$，然后再将 i_1, i_2, …, i_n 中的 $1\to j_1$, $2\to j_2$, …, $n\to j_n$. 它等同于进行一次置换，$1\to p_{i_1}$, $2\to p_{i_2}$, …, $n\to p_{i_n}$，由此可定义置换的乘法，即

$$P_2P_1=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ j_1 & j_2 & j_3 & \cdots & j_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\end{pmatrix}$$

$$=P_3=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ p_{i_1} & p_{i_2} & p_{i_3} & \cdots & p_{i_n}\end{pmatrix}$$

乘法运算规则为把 P_2 改写为

$$P_2=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ j_1 & j_2 & j_3 & \cdots & j_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\\ p_{i_1} & p_{i_2} & p_{i_3} & \cdots & p_{i_n}\end{pmatrix}$$

于是

$$P_2P_1=\begin{pmatrix}i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\\ p_{i_1} & p_{i_2} & p_{i_3} & \cdots & p_{i_n}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ p_{i_1} & p_{i_2} & p_{i_3} & \cdots & p_{i_n}\end{pmatrix}\tag{7.1.2}$$

例如对 4 个对象的置换

$$P_1=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 4 & 1 & 3\end{pmatrix},\quad P_2=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 3 & 1 & 2 & 4\end{pmatrix}$$

由(7.1.2)式得到

$$P_2P_1=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 3 & 1 & 2 & 4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 4 & 1 & 3\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}2 & 4 & 1 & 3\\ 1 & 4 & 3 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 4 & 1 & 3\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 1 & 4 & 3 & 2\end{pmatrix}=P_3$$

它表示先 $1\to2$，然后再 $2\to1$，结果是 $1\to1$；先 $2\to4$，然后再 $4\to4$，结果为 $2\to4$；先 $3\to1$，再 $1\to3$，结果为 $3\to3$；先 $4\to3$，再 $3\to2$，结果为 $4\to2$.

置换

$$P=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\end{pmatrix}\quad 与\quad P^{-1}=\begin{pmatrix}i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & n\end{pmatrix}\tag{7.1.3}$$

互为逆置换，因为，按乘法规则

$$P^{-1}P=\begin{pmatrix}i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$PP^{-1}=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & n\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\end{pmatrix}$$

而$\begin{pmatrix}i_1 & i_2 & \cdots & i_n\\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n\end{pmatrix}$表示没有置换，即单位元.

置换乘法显然符合结合律，对这种乘法，$n!$个置换是封闭的，在$n!$个置换中存在单位元

$$e=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

对每一个置换都存在一个逆置换，因而它们构成一个群，称为置换群.

置换群是非阿贝尔群，比如

$$\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 3 & 4 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 3 & 4 & 2 & 1\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}3 & 4 & 2 & 1\\ 4 & 1 & 3 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 3 & 4 & 2 & 1\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 4 & 1 & 3 & 2\end{pmatrix}$$

而

$$\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 3 & 4 & 2 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 3 & 4 & 1\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}2 & 3 & 4 & 1\\ 4 & 2 & 1 & 3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 3 & 4 & 1\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 4 & 2 & 1 & 3\end{pmatrix}$$

即一般情况下

$$P_1P_2\neq P_2P_1$$

7.1.2 循环与对换及置换的分解

如果在n个数字中有$m(m\leqslant n)$个数字$i_1, i_2, i_3, \cdots, i_m$相互变换，即$i_1\to i_2$，$i_2\to i_3$，$\cdots$，$i_{m-2}\to i_{m-1}$，$i_{m-1}\to i_m$，$i_m\to i_1$，则称为$m$个数字的循环(cyclic)或轮换，$m$称为循环的长度，并记为$(i_1, i_2, i_3, \cdots, i_{m-1}, i_m)$. 按定义循环$(i_1, i_2, i_3, \cdots, i_{m-1}, i_m)$用置换符号表示则为

$$(i_1, i_2, i_3, \cdots, i_m)$$
$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_{m-1} & \cdots & i_m & \cdots & n-1 & n\\ 1 & 2 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_4 & \cdots & i_m & \cdots & i_1 & \cdots & n-1 & n\end{pmatrix}$$

如

$$(2,5,6)=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6\\1&5&3&4&6&2\end{pmatrix}$$

长度为 2 的循环称为对换或交换(transposition)，

$$(i_1,i_2)=\begin{pmatrix}1&2&\cdots&i_1&\cdots&i_2&\cdots&n-1&n\\1&2&\cdots&i_2&\cdots&i_1&\cdots&n-1&n\end{pmatrix}$$

长度为 1 的循环(i)表示在置换中数字 i 不变. 容易证明循环$(i_1, i_2, \cdots, i_m)$的逆为

$$(i_1,i_2,\cdots,i_m)^{-1}=(i_m,i_{m-1},\cdots,i_2,i_1) \tag{7.1.4}$$

任何一个置换都可唯一地分解为若干个循环的乘积，这些循环中没有相同的数字，称为相互独立的循环. 如

$$\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6&7&8&9\\3&5&8&6&1&2&4&7&9\end{pmatrix}=(1,3,8,7,4,6,2,5)(9)$$

$$\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6&7&8&9\\4&3&5&1&2&7&6&9&8\end{pmatrix}=(1,4)(2,3,5)(6,7)(8,9)$$

对于给定的置换，分解为循环的乘积是容易的. 首先检查 1 在置换中的变换，如果 $1\to i_1$，再看 i_1 变为什么，如果 $i_1\to i_2$，再看 i_2，直至检查到某个 $i_m\to 1$，就得到了包括 1 的一个长度为 m 的循环. 然后对这个循环中不包括的最小的数进行检查，便可得到一个包括这个数的循环. 而后对这两个循环中都不包括的最小的数进行同样检查又可得到一个循环，直至检查了所有的数就得到了循环分解. 在这种分解中对于置换中不变的数字，比如 $i\to i$ 写为长度为 1 的循环，即(i). 按照惯例一般都把长度为 1 的循环(i)省略不写.

循环$(i_1, i_2, i_3, \cdots, i_m)$重要的是表示 $i_1\to i_2\to i_3\to i_m\to i_1$，因而它具有如下性质:

$$\begin{aligned}(i_1,i_2,i_3,\cdots,i_m)&=(i_m,i_1,i_2,\cdots,i_{m-1})\\&=(i_{m-1},i_m,i_1,i_2,\cdots,i_{m-2})\\&=\cdots\cdots\\&=(i_2,i_3,\cdots,i_{m-1},i_m,i_1)\end{aligned}$$

用若干独立循环相乘描述的置换，其中每个循环是可以交换的，如

$$\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6&7\\3&4&1&5&6&2&7\end{pmatrix}=(1,3)(2,4,5,6)=(2,4,5,6)(1,3)$$

由于每一个置换都可唯一地写为一些独立循环的乘积，因而每一个置换都具有一定的循环结构，即长度为 1 的循环有 ν_1 个，长度为 2 的循环为 ν_2 个，…，长度为 n 的循环有 ν_n 个. 用$(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, 3^{\nu_3}, \cdots, n^{\nu_n})$标记循环结构. 显然 $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \cdots, \nu_n$ 必须满足方程

$$\nu_1+2\nu_2+3\nu_3+,\cdots,+n\nu_n=n \tag{7.1.5}$$

这是因为 S_n 群的置换是 n 个数字间的相互变换，ν_i 个长度为 i 的循环包括 $i\nu_i$ 个数字，全部循环所包括的数字必须是 n，因而存在(7.1.5)式.

任何一个长度为 m 的循环都可分解为$(m-1)$个对换的乘积，分解规则为

$$\begin{aligned}&(i_1,i_2,i_3,\cdots,i_m)\\&=(i_1,i_m)(i_1,i_{m-1})(i_1,i_{m-2})\cdots(i_1,i_3)(i_1,i_2)\end{aligned} \tag{7.1.6}$$

如果把对换写为置换，再利用置换乘法规则不难证明(7.1.6)式的正确性. 比如

$$(i_1, i_3)(i_1, i_2)$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & i_3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_1 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$\cdot\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_1 & \cdots & i_3 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_1 & \cdots & i_3 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_1 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$\cdot\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_1 & \cdots & i_3 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_1 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$=(i_1, i_2, i_3)$$

$$(i_1, i_4)(i_1, i_3)(i_1, i_2)$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_4 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & i_4 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_1 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$\cdot\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_4 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_4 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_4 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_4 & \cdots & i_1 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$\cdot\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_4 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_4 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_4 & \cdots & n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & i_2 & \cdots & i_3 & \cdots & i_4 & \cdots & i_1 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$=(i_1, i_2, i_3, i_4)$$

利用数学归纳法就可证明(7.1.6)式对任意长度的循环都是正确的.

注意在(7.1.6)式中出现的$(m-1)$个对换，或称为长为2的循环，并不是独立的，它们中包括相同的数字i_1，因而顺序是不可交换的. 而且循环分解为对换的乘积的方式并不是唯一的，因为任何一个对换(i_1, i_2)都可表示为三个对换之积，即

$$(i_1, i_2)=(m, i_1)(m, i_2)(m, i_1) \tag{7.1.7}$$

因为按置换乘法

$$(m, i_1)(m, i_2)(m, i_1)$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & i_1 & \cdots & m & \cdots & i_2 & \cdots & n\\ 1 & 2 & \cdots & m & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$\cdot\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & i_1 & \cdots & m & \cdots & i_2 & \cdots & n\\ 1 & 2 & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & m & & \cdots\end{pmatrix}$$

$$\cdot\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & i_1 & \cdots & m & \cdots & i_2 & \cdots & n\\ 1 & 2 & \cdots & m & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & i_1 & \cdots & m & \cdots & i_2 & \cdots & n\\ 1 & 2 & \cdots & m & \cdots & i_1 & \cdots & i_2 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$\cdot\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & i_1 & \cdots & m & \cdots & i_2 & \cdots & n\\ 1 & 2 & \cdots & i_2 & \cdots & i_1 & \cdots & m & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & i_1 & \cdots & m\cdots & i_2 & \cdots & n\\ 1 & 2 & \cdots & i_2 & \cdots & m & \cdots & i_1 & \cdots & n\end{pmatrix}$$

$$=(i_1,\ i_2)$$

这表明一个对换(i, j)可用各种不同m的三个对换之积表示.

通过前面讨论，可得到任何一个具有循环结构$(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, 3^{\nu_3}, \cdots, n^{\nu_n})$的置换，可分解为至少包括$p$个对换的乘积，$p$为

$$p = \sum_{i=2}^{n} \nu_i (i-1) \tag{7.1.8}$$

因为在分解成对换之积时，分解中所包括的对换可按(7.1.7)式写成另三个对换之积，因而这种分解是有一定任意性的. 然而容易看到如果一定置换的P是偶数(或奇数)，则它分解为对换之积的所有可能的表达式中一定包括偶数(或奇数)个对换. 因而一个置换包括偶数或奇数个对换是这个置换的本质属性之一，称包括偶数(或奇数)个对换的置换为偶置换(或奇置换).

显然偶置换与偶置换之积还是偶置换，偶置换与奇置换之积为奇置换，奇置换与奇置换之积为偶置换. 在S_n群的$S!$个置换中，奇置换和偶置换各有$\frac{1}{2}n!$个.

由(7.1.7)式可看出任何对换都可表示为指定m的三个对换之积，为了确定取$m=1$，则得到包括1的$(n-1)$个对换$(1, 2)$，$(1, 3)$，…，$(1, n-1)$，$(1, n)$，由它们中的三个可表示任何对换. 于是，一切置换都可表示为$(n-1)$个对换$(1, i)$ $(i=2, 3, \cdots, n)$中特定k个对换之积，$k \geqslant p$，k与p有相同的奇偶性，因而可写为

$$k = p + 2q$$

q为正整数.

7.2 置换群的共轭元素类，分割与 Young 图

7.2.1 置换群的共轭类

一个群存在哪些共轭元素类，每一类中有哪些元素，相互共轭的元素有哪些特征，是群论的重要课题.

在置换群 S_n 中，共轭元素类存在如下定理.

定理 7.2.1　在置换群 S_n 中，具有相同循环结构的元素相互为共轭元素，而且相互共轭的元素一定具有相同的循环结构. 或者说具有相同循环结构是构成共轭元素的充要条件.

证明　按共轭元素的定义，如果置换 P 和 Q 相互共轭，则一定存在一个置换 R，使

$$P = RQR^{-1} \tag{7.2.1}$$

把置换 Q 分解为独立循环之积：

$$Q = Q_1 Q_2 \cdots Q_m$$

其中 $Q_1, Q_2, \cdots, Q_m$ 为 Q 中包括的各种独立的循环，它们的循环长度分别为$(l_1, l_2, \cdots, l_m)$，则(7.2.1)式变为

$$RQR^{-1} = RQ_1R^{-1}RQ_2, R^{-1}\cdots RQ_mR^{-1} \tag{7.2.2}$$

下面来证明 RQ_iR^{-1}仍然为一长度为 l_i 的循环，为此把循环 Q_i 写为置换的形式：

$$Q_i = (q_1^i, q_2^i, \cdots, q_{l_i}^i) = \begin{pmatrix} q_1^i & q_2^i & \cdots & q_{l_i}^i & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-l_i} \\ q_2^i & q_3^i & \cdots & q_1^i & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-l_i} \end{pmatrix}$$

其中 $n-l_i$ 个 a_j 是不包括在 q_j^i 中的 $n-l_i$ 个数. 置换 R 可写为

$$R = \begin{pmatrix} q_1^i & q_2^i & \cdots & q_{l_i}^i & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-l_i} \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_{l_i} & P_1 & P_2 & \cdots & P_{n-l_i} \end{pmatrix}$$

$$R^{-1} = \begin{pmatrix} r_1 & r_2 & \cdots & r_{l_i} & P_1 & P_2 & \cdots & P_{n-l_i} \\ q_1^i & q_2^i & \cdots & q_{l_i}^i & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-l_i} \end{pmatrix}$$

于是按乘法规则得到

$$\begin{aligned} RQ_iR^{-1} &= \begin{pmatrix} q_1^i & q_2^i & \cdots & q_{l_i}^i & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-l_i} \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_{l_i} & P_1 & P_2 & \cdots & P_{n-l_i} \end{pmatrix} \\ &\cdot \begin{pmatrix} q_1^i & \cdots & q_{l_i}^i & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-l_i} \\ q_2^i & \cdots & q_1^i & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-l_i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 & r_2 & \cdots & r_{l_i} & P_1 & P_2 & \cdots & P_{n-l_i} \\ q_1^i & q_2^i & \cdots & q_{l_i}^i & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-l_i} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} r_1 & r_2 & \cdots & r_{l_i} & P_1 & P_2 & \cdots & P_{n-l_i} \\ r_2 & r_3 & \cdots & r_1 & P_1 & P_2 & \cdots & P_{n-l_i} \end{pmatrix} \\ &= (r_1, r_2, \cdots, r_{l_i}) \end{aligned} \tag{7.2.3}$$

这就证明了与 Q 共轭的元素 $P = RQR^{-1}$有与 Q 相同的循环结构，也就是定理中的必要性.

如果置换 P 和 Q 有相同的循环结构，也就是说把 P 和 Q 分解为独立的循环之积时，

$$P = P_1P_2\cdots P_m, \qquad Q = Q_1Q_2\cdots Q_m$$

而且 P_i 与 Q_i 有相同的循环长度：

$$P_i = (p_1^i p_2^i, \cdots, p_{l_i}^i), \qquad Q_i = (q_1^i q_2^i, \cdots, q_{l_i}^i)$$

则如下的置换 R，使得

$$P = RQR^{-1}$$

这个 R 为

$$R = \begin{pmatrix} q_1^1 & q_2^1 & \cdots & q_{l_1}^1 & q_1^2 & \cdots & q_{l_2}^2 & \cdots & q_1^m & \cdots & q_{l_m}^m \\ p_1^1 & p_2^1 & \cdots & p_{l_1}^1 & p_1^2 & \cdots & p_{l_2}^2 & \cdots & p_1^m & \cdots & p_{l_m}^m \end{pmatrix}$$

由乘法规则可计算出 $P = R \cdot Q \cdot R^{-1}$，因而具有相同循环结构的置换 P 与 Q 相互共轭，这就证明了定理中的充分性.

由这个定理可得到循环结构可作为共轭类的标记. 下面计算以一定循环结构 $(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$ 标记的共轭类中相互共轭的置换的数目.

对于循环结构为 $(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, k\nu_k)$ 的置换可如下表示：

$$\underbrace{(\bigcirc)(\bigcirc)\cdots(\bigcirc)}_{\nu_1}$$

$$\underbrace{(\bigcirc\bigcirc)(\bigcirc\bigcirc)\cdots(\bigcirc\bigcirc)}_{\nu_2}$$

……………………

$$\underbrace{\overbrace{(\bigcirc\bigcirc\cdots\bigcirc)}^{k}(\bigcirc\bigcirc\cdots\bigcirc)\cdots(\bigcirc\bigcirc\cdots\bigcirc)}_{\nu_k}$$

在每个圈中任意填充 1, 2, …, n 中的数（不重复），可能的填充数目为 $n!$，但是有两种原因使不同的填充代表同一个置换.

（1）在包括 ν_k 个长为 k 的循环中，由于不同循环可以交换顺序，而

$$(i_1, i_2, \cdots, i_k)\cdots(j_1, j_2, \cdots, j_k) = (j_1, j_2, \cdots, j_k)\cdots(i_1, i_2, \cdots, i_k)$$

因而在 $n!$ 个置换中将出现 $\nu_k!$ 个由于这种交换而产生的相同的置换. 于是这种由于相同长度的循环交换而产生的总的重复数为 $\nu_1!\nu_2!\cdots\nu_n!$.

（2）由于每个长度为 k 的循环有 k 种不同写法：

$$\begin{aligned}(i_1, i_2, i_3, \cdots, i_k) &= (i_k, i_1, i_2, \cdots, i_{k-1}) \\ &= (i_{k-1}, i_k, i_1, \cdots, i_{k-2}) \\ &= \cdots\cdots \\ &= (i_2, i_3, \cdots, i_k, i_1)\end{aligned}$$

而 ν_k 个长为 k 的循环由这种原因造成的重复度为 k^{ν_k} 种，总的重复为 $1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots k^{\nu_k}\cdots n^{\nu_n}$.

因而这种循环结构所包括的独立置换数为 $n!$，被这两种原因造成的总的重复数目相除，即

$$m(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n}) = \frac{n!}{1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n}\,\nu_1!\nu_2!\cdots\nu_n!} \tag{7.2.4}$$

$m(1^{\nu_1}2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$ 为循环结构为 $(1^{\nu_1}2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$ 的共轭类中包括的置换数，若把循环结构 $(1^{\nu_1}2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$ 简单记为 (ν)，则相应类中的共轭元素数可记为 $m(\nu)$.

7.2.2 分割与 Young 图

对于一定的循环结构 $(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$，令

$$\begin{cases}\nu_1+\nu_2+\cdots+\nu_n=\lambda_1\\ \nu_2+\cdots+\nu_n=\lambda_2\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\ \nu_{n-1}+\nu_n=\lambda_{n-1}\\ \nu_n=\lambda_n\end{cases}\tag{7.2.5}$$

容易看到

$$\sum_i\lambda_i=n,\ n\geqslant\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant,\cdots,\geqslant\lambda_n\geqslant 0\tag{7.2.6}$$

因而由一定的循环结构可定义一组满足方程(7.2.6)的 n 个数 λ_i，记为$[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$，称任何一组满足方程(7.2.6)的数$[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$为数 n 的一个分割(partition).

由给定的分割$[\lambda_2\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$可利用(7.2.5)式求解出一组 ν_i：

$$\begin{cases}\nu_1=\lambda_1-\lambda_2\\ \nu_2=\lambda_2-\lambda_3\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\\ \nu_i=\lambda_i-\lambda_{i+1}\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\\ \nu_n=\lambda_n\end{cases}\tag{7.2.7}$$

因而任一给定的分割$[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$，也同样标志一个循环结构.

引入分割最根本的原因在于一个分割可用一个包括 n 个方块的图形进行研究，称这种图形为 Young 图. 它由 n 行的方块构成，这 n 行左边对齐第一行包括 λ_1 个方块，第二行包括 λ_2 个方块，第 i 行包括 λ_i 个方块，第 n 行包括 λ_n 个方块，总方块数为 $\lambda_1+\lambda_2+,\cdots,\lambda_n=n$.

对于 S_n 群，用 n 个方块按满足方程(7.2.6)的 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 画出所有可能的图形，就得到了 S_n 群的全部可能的循环结构，也就找到了 S_n 群的全部共轭类.

比如下面对 S_2，S_3，S_4 画出了它们的所有可能的图形(即 Young 图)，也就得到了它们的全部共轭类.

S_2：

$[\lambda_1]=[2,0]$　$(\nu)=(1^2 2^0)$

$\nu_1=2$

$\nu_2=0$

$[\lambda_2]=[1,1]$　$(\nu)=(1^0 2^1)$

$\nu_1=0$

$\nu_2=1$

S_3：

$[\lambda_1]=[3,0,0]$　$(\nu)=(1^3 2^0 3^0)$

$\nu_1=3$

$\nu_2=\nu_3=0$

$[\lambda_2]=[2,1,0]$　$(\nu)=(1^1 2^1 3^0)$

$\nu_1=1$

$\nu_2=1$

$\nu_3=0$

$[\lambda_3]=[1,1,1]$ $(\nu)=(1^0 2^0 3^1)$

$\nu_1=\nu_2=0$

$\nu_3=1$

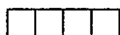


S_4:

$[\lambda_1]=[4,0,0,0]$ $(\nu)=(1^4 2^0 3^0 4^0)$

$\nu_1=4$

$\nu_2=\nu_3=\nu_4=0$



$[\lambda_2]=[3,1,0,0]$ $(\nu)=(1^2 2^1 3^0 4^0)$

$\nu_1=2$

$\nu_2=1$

$\nu_3=\nu_4=0$

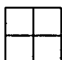


$[\lambda_3]=[2,2,0,0]$ $(\nu)=(1^0 2^2 3^0 4^0)$

$\nu_1=0$

$\nu_2=2$

$\nu_3=\nu_4=0$



$[\lambda_4]=[2,1,1,0]$ $(\nu)=(1^1 2^0 3^1 4^0)$

$\nu_1=1$

$\nu_2=0$

$\nu_3=1$

$\nu_4=0$



$[\lambda_5]=[1,1,1,1]$ $(\nu)=(1^0 2^0 3^0 4^1)$

$\nu_1=\nu_2=\nu_3=\nu_4=1$



第一章中已讨论过有限群的不等价不可约表示数目等于这个群的共轭类的数目，因而置换群所有可能的 Young 图的数目等于它的不等价不可约表示的数目，可用 Young 图（也就是分割）来标记不可约表示，Young 图对研究置换群的不可约表示有着重要的意义，这将在后面置换群的不可约表示部分进行讨论.

7.3 置换群的子群与 Caylay 定理

置换群 S_n 有很多子群，比如对 S_n 群中被置换的 n 个数字 $1, 2, \cdots, n$ 中的任意 k 个数固定不变，则剩余的置换仅有 $(n-k)!$ 个，显然它们构成置换群 S_{n-k}，它是 S_n 的子群（当 $n>k>0$ 时为非平庸子群）.

显然上节中讨论的 S_n 群中的 $\frac{1}{2}n!$ 个偶置换构成 S_n 群的一个子群（偶置换之积仍然为偶置换），称为 S_n 群的偶置换子群，一般记为 A_n. 容易证明 A_n 是 S_n 群的不变子群. 因为具有一定循环结构 $(1^{\nu_1}2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$ 的全部 $m(\nu)$（或 $m([\lambda])$）个置换属于同一个共轭类，它们有共同的由循环结构决定的奇偶性，因而偶置换子群包括了具有偶置换性质的全部共轭元素类. 可以证明当 $n\neq 2$ 和 $n\neq 4$ 时，S_n 群的指数为 2 的不变子群只有偶置换子群 A_n. 指数为 2 的子群，即子群的阶为大群阶的一半.

例　S_4 群的子群.

S_4 群共有 $4!=24$ 个元素，包括 5 个类，下表列出了它们的全部元素：

循环结构	Young 图	元素的奇偶性	类中元素数	元　素
$(1^0 2^0 3^0 4^1)$	[4]	奇	6	(1234), (1324), (1432) (2134), (2314), (2431)
$(1^1 2^0 3^1 4^0)$	[3,1]	偶	8	(123), (132), (124), (142) (134), (143), (234), (243)
$(1^0 2^2 3^0 4^0)$	[2,2]	偶	3	(12)·(34), (13)·(24), (14)·(23)
$(1^2 2^1 3^0 4^0)$	[2,1,1]	奇	6	(12), (13), (14) (23), (24), (34)
$(1^4 2^0 3^0 4^0)$	[1,1,1,1]	偶	1	$e=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\1 & 2 & 3 & 4\end{pmatrix}$ $=(1)(2)(3)(4)$

在上表中把置换用分解为循环的乘积表示，省略了长度为 1 的循环，可以看到偶置换子群 A_4 共 12 个元素：

$(1^1 2^0 3^1 4^0)$类 8 个元素；

$(1^0 2^2 3^0 4^0)$类 3 个元素；

$(1^4 2^0 3^0 4^0)$类 1 个元素.

另一个子群记为 V，也是不变子群：

$(1^0 2^2 3^0 4^0)$类 3 个元素；

$(1^4 2^0 3^0 4^0)$类 1 个元素.

通过分析可看到商群 S_4/V 与 S_3 群同构.

置换群 S_n 的某一子群与 n 阶有限群之间存在同构关系，也就是说任一个 n 阶有限群一定同构于 S_n 群的某一子群，这一结论即下面将证明的 Caylay 定理. 因而研究置换群对研究有限群有重要意义.

定理 7.3.1(Caylay 定理)　任何 n 阶有限群 G 都与置换群 S_n 的某一子群同构.

证明　令 $g_1, g_2, \cdots, g_n$ 为 n 阶群 G 的 n 个元素，由第一章讨论的群的重排定理知道

$$g_j \cdot g_{i_1} = g_{j_p} \quad \text{或} \quad g_j\{g_1, g_2, \cdots, g_n\} = \{g_{j_1}, g_{j_2}, \cdots, g_{j_n}\}$$

这就是说，群元素 g_j 作用到按 $i_1, i_2, \cdots, i_n$ 编顺的群元素序列$\{g_{i_1}, g_{i_2}, \cdots, g_{i_n}\}$上时，使之变为元素序列$\{g_{j_1}, g_{j_2}, \cdots, g_{j_n}\}$，其效果等同于对元素序列进行一个置换，把元素序列$(g_{i_1}, g_{i_2}, \cdots, g_{i_n})$变为序列$(g_j \cdot g_{i_1}, g_j \cdot g_{i_2}, \cdots, g_j \cdot g_{i_n}) = (g_{j_1}, g_{j_2}, \cdots, g_{j_n})$，于是这个置换可写为

$$P(g_j)=\begin{pmatrix} g_{i_1} & g_{i_2} & \cdots & g_{i_n} \\ g_j\cdot g_{i_1} & g_j\cdot g_{i_2} & \cdots & g_j\cdot g_{i_n}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} g_{i_1} & g_{i_2} & \cdots & g_{i_n} \\ g_{j_1} & g_{j_2} & \cdots & g_{j_n}\end{pmatrix}$$

置换的变化规则完全决定于群 G 的乘法规则，即 $g_j g_{i_\alpha}=g_{j_\alpha}$. 因此对群 G 的 n 个元素 g_{i_α} $(i_\alpha=1, 2, \cdots, n)$ 由群的乘法唯一地决定了与群 S_n 的 n 个特定元素相对应.

对于 $P(g_j)$ 与 $P(g_l)$ 相乘，可得到

$$\begin{aligned} P(g_j)\cdot P(g_l) &=\begin{pmatrix} g_{i_1} & g_{i_2} & \cdots & g_{i_n} \\ g_{j_1} & g_{j_2} & \cdots & g_{j_n}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} g_{i_1} & g_{i_2} & \cdots & g_{i_n} \\ g_{l_1} & g_{l_2} & \cdots & g_{l_n}\end{pmatrix} \\ &=\begin{pmatrix} g_{i_1} & g_{i_2} & \cdots & g_{i_n} \\ g_j\cdot g_{i_1} & g_j\cdot g_{i_2} & \cdots & g_j\cdot g_{i_n}\end{pmatrix} \\ &\quad\cdot\begin{pmatrix} g_{i_1} & g_{i_2} & \cdots & g_{i_n} \\ g_l\cdot g_{i_1} & g_l\cdot g_{i_2} & \cdots & g_l\cdot g_{i_n}\end{pmatrix} \\ &=\begin{pmatrix} g_l\cdot g_{i_1} & g_l\cdot g_{i_2} & \cdots & g_l\cdot g_{i_n} \\ g_j\cdot g_l\cdot g_{i_1} & g_j\cdot g_l\cdot g_{i_2} & \cdots & g_j\cdot g_l\cdot g_{i_n}\end{pmatrix} \\ &\quad\cdot\begin{pmatrix} g_{i_1} & g_{i_2} & \cdots & g_{i_n} \\ g_l\cdot g_{i_1} & g_l\cdot g_{i_2} & \cdots & g_l\cdot g_{i_n}\end{pmatrix} \\ &=\begin{pmatrix} g_{i_1} & g_{i_2} & \cdots & g_{i_n} \\ g_j\cdot g_l\cdot g_{i_1} & g_j\cdot g_l\cdot g_{i_2} & \cdots & g_j\cdot g_l\cdot g_{i_n}\end{pmatrix}\end{aligned}$$

这就证明了：如果 $g_j\Rightarrow P(g_j)$，$g_l\Rightarrow P(g_l)$，则 $g_j\cdot g_l\Rightarrow P(g_j\cdot g_l)$. 根据同构的定义，$n$ 阶群 G 与 n 个 S_n 的元素是同构的. 由于 g_{i_1}，$g_{i_2}\cdots$，g_{i_n} 构成一个群，因而 n 个置换 $\{P(g_{i_1})$，$P(g_{i_2})$，$\cdots$，$P(g_{i_n})\}$ 必然也构成一个群，当然是 S_n 的子群，这就证明了 Caylay 定理.

下面举一些点群与某一置换群或它的子群同构的例子.

(1) 2 阶点群 C_2，σ，C_{1h} 都与置换群 S_2 群同构.

(2) S_3 群与 D_3，C_{3v} 群同构，它们的元素间的对应关系为：

S_3	D_3	C_{3v}
e	e	e
(1 2 3)	C_3	C_3
(1 3 2)	C_3^2	C_3^2
(1 2)	$C_2^{(3)}$	σ_3
(1 3)	$C_2^{(2)}$	σ_2
(2 3)	$C_2^{(1)}$	σ_1

S_3 群为 S_6 群的子群.

(3) S_4 群的偶置换子群 A_4 与 T 群同构，元素对应关系为：

A_4	e	(123)	(124)	(134)	(234)	(132)
T	e	$C_3^{(4)}$	$C_3^{(3)}$	$C_3^{(2)}$	$C_3^{(1)}$	$C_3^{(4)2}$
A_4	(142)	(143)	(243)	(12)(34)	(13)(24)	(14)(23)
T	$C_3^{(3)2}$	$C_3^{(2)2}$	$C_3^{(1)2}$	$C_2^{(1)}$	$C_2^{(3)}$	$C_2^{(3)}$

(4) O 群与 T_d 群同构，它们与 S_6 群的一个子群同构.

7.4　Frobenius 公式与置换群的特征标

置换群的表示理论可用不同方法进行研究. 比如通过定义投影算子研究表示空间与投影算子的对应关系，寻求它的全部本原幂等元(Primitive idempotent element)，然后从正则表示分解出全部不可约表示. 为了避免过多的数学概念，本章从 Frobenius 公式出发，寻求置换群的不可约表示的特征标，然后建立不可约表示与 Young 图的关系，再来讨论不可约表示及其基矢.

7.4.1　由子群特征标推导群的特征标

群 G 的阶为 n_g，它的子群 H 的阶为 n_h($1<n_h<n_g$ 为真子群)，群 G 包括 k 个类 c_i($i=1, 2, \cdots, k$)，每个类中有 m_i 个元素. c_i 类中的 m_i 个元素对于子群 H 一般并不属于同一个类，可能分属于不同的若干个类. $D^{(\mu)}(g_i)$ 为群 G 的不可约表示 μ 的表示矩阵，当取元素 $g_i=h_i$ 为子群 H 的元素时，$D^{(\mu)}(h_i)$($h_i\in H$)变为子群的表示(分导表示). 但是此时对于子群 H，$D^{(\mu)}$一般不再是不可约表示，因而可按 H 的不可约表示 $\Delta^{(\nu)}(h_i)$分解，于是得到

$$D^{(\mu)}(h_i) = \sum_{\nu} \oplus a_{\mu\nu}\Delta^{(\nu)}(h_i), \quad h_i \in H \tag{7.4.1}$$

如果 $g_{i_1}g_{i_2}\cdots g_{i_{m_i}}$为 G 群 c_i 类的元素，其中包括子群 H 的元素 h_{i_1}, h_{i_2}, $\cdots$, h_{i_α}，它们属于 H 的不同类，比如 h_{i_1}属于 p_{i_1}类，h_{i_2}属于 p_{i_2}类等等. 于是，由(7.4.1)式可得到特征标的关系

$$\chi^{(\mu)}_{(h_{i_1})} = \sum_{\nu} a_{\mu\nu}\delta^{(\nu)}_{(h_{i_1})} \tag{7.4.2}$$

$\delta^{(\nu)}_{(h_{i_1})}$为 H 群不可约表示 ν 的特征标，因为特征标是类的函数，群 G 的特征标

$$\chi^{(\mu)}_{(h_{i_1})} = \chi^{(\mu)}_{(h_{i_2})} = \cdots = \chi^{(\mu)}_{(h_{c_i})}$$

但是对于子群元素 h_{i_1}, h_{i_2}, $\cdots$, h_{i_α}分属于几个不同的类，h_{i_1}属于子群 H 的 p_{i_1}类，h_{i_2}属于 p_{i_2}类，等等. 因而特征标

$$\delta^{(\nu)}_{(h_{i_1})} = \delta^{(\nu)}_{p_{i_1}}\text{不一定与}\ \delta^{(\nu)}_{(h_{i_2})} = \delta^{(\nu)}_{p_{i_2}}\text{相同}$$

$\delta^{(\nu)}_{p_{i_1}}$和 $\delta^{(\nu)}_{p_{i_2}}$分别为子群 H 的 p_{i_1}和 p_{i_2}类的特征标. 于是由(7.4.1)式得到特征标公式(7.4.2)式变为

$$\chi^{(\mu)}_{c_i} = \sum_{\nu} a_{\mu\nu}\delta^{(\nu)}_{p_{i_1}} = \sum_{\nu} a_{\mu\nu}\delta^{(\nu)}_{p_{i_2}} = \cdots \tag{7.4.3}$$

用 G 群 c_j 类($c_j \neq c_i$)的特征标的复数共轭 $\chi_j^{(\mu)*}$ 乘(7.4.3)式，并对不可约表示 μ 求和，利用特征标的正交定理可得到

$$\sum_{\mu} \chi_{c_i}^{(\mu)} \chi_{c_j}^{(\mu)*} = 0 = \sum_{\mu\nu} a_{\mu\nu} \delta_{\alpha}^{(\nu)} \chi_{c_j}^{(\mu)*} \quad (c_i \neq c_j) \tag{7.4.4}$$

式中 H 群的特征标 $\delta_{\alpha}^{(\nu)}$ 为 G 群 c_i 类到子群 H 所得到的各种类 p_{i_1}，p_{i_2}，…，的代表. (7.4.4)式又可写为

$$\sum_{\nu} \left[\sum_{\mu} a_{\mu\nu} \chi_{c_j}^{(\mu)*} \right] \delta_{\alpha}^{(\nu)} = 0 \tag{7.4.4'}$$

在(7.4.3)式中，因为左端为 G 群的 c_i 类，右端 H 群一定是 c_i 类分解到子群 H 得到的 p_{i_k} 类，而(7.4.4)式已通过对 G 群不可约表示 μ 求和，使 c_i 类的不可约表示不出现了，因而式中子群 H 的类 α 是任意的.

以 m_{α}^{h} 表示子群 H 第 α 类中元素数，则(7.4.4′)式乘以 $m_{\alpha}^{h}\delta_{\alpha}^{(\rho)*}/n_h$，并对类 α 求和，利用特征标正交定理得到

$$\sum_{\alpha} \sum_{\nu} \left[\sum_{\mu} a_{\mu\nu} \chi_{c_j}^{(\mu)*} \right] \delta_{\alpha}^{(\nu)} \delta_{\alpha}^{(\rho)*} \frac{m_{\alpha}^{h}}{n_h} = \sum_{\nu} \sum_{\mu} a_{\mu\nu} \chi_{c_j}^{(\mu)*} \delta_{\nu\rho}$$

由此得到

$$\sum_{\mu} a_{\mu\nu} \chi_{c_j}^{(\mu)*} = 0 \quad \text{或} \quad \sum_{\mu} a_{\mu\nu} \chi_{c_j}^{(\mu)} = 0 \tag{7.4.5}$$

此式对子群 H 的所有不可约表示 ν 和所有的类 α 均成立.

另一方面，用 $m_{\alpha}^{h}\delta_{\alpha}^{(\sigma)*}$ 乘(7.4.3)式，并对子群 H 的类 α 求和，则得到

$$n_h a_{\mu\sigma} = \sum_{\alpha} m_{\alpha}^{h} \delta_{\alpha}^{(\sigma)*} \chi_{c_i}^{(\mu)} \tag{7.4.6}$$

(7.4.6)式中 G 群的 i_α 类包括子群 α 类. 对上式乘以 $m_l^{g}\chi_{c_l}^{(\mu)*}$(为了不与子群 H 中类内元素数相混淆 m_l^{g} 为群 G 中 l 类的元素数)，并对 μ 求和；利用群 G 特征标正交定理得到

$$n_h m_l^{g} \sum_{\mu} a_{\mu\sigma} \chi_{c_l}^{(\mu)*} = n_g \sum_{\alpha \in c_l} m_{\alpha}^{h} \delta_{\alpha}^{(\sigma)*} \tag{7.4.7}$$

此式中由于特征标正交定理中包括 δ_{il}，因而对 H 群中类 α 的求和仅对 G 群 c_l 类中分解到 H 群所得到的类进行，上式也可写为

$$\sum_{\mu} a_{\mu\sigma} \chi_{c_l}^{(\mu)} = \sum_{\alpha \in c_l} \frac{n_g\, m_{\alpha}^{h}}{n_h\, m_l^{g}} \delta_{\alpha}^{(\sigma)} \tag{7.4.8}$$

对于任何群 H 都存在一个恒等表示，记这个表示为 A，它的特征标对所有元素都为 1，即 $\delta_{\alpha}^{(A)} = 1$. 于是(7.4.8)式变为

$$\frac{n_g\, m_l^{h}}{n_h\, m_l^{g}} = \sum_{\mu} a_{\mu A} \chi_{c_l}^{(\mu)} \tag{7.4.9}$$

其中 m_l^{h} 为群 G 的 c_l 类中的元素，包括在子群 H 中的数目.

(7.4.8)式和(7.4.9)式对讨论群 G 的特征标十分重要，它们给出了群 G 的特征标的混合. 通常定义

$$\Psi_{c_l}^{(\sigma)} = \sum_{M} a_{\mu\sigma} \chi_{c_l}^{(\mu)} = \sum_{\alpha \in c_l} \frac{n_g\, m_l^{h}}{n_h\, m_l^{g}} \delta_{\alpha}^{(\sigma)} \tag{7.4.10}$$

称为群 G 的混合特征标. 实际上由第三章关于诱导表示的讨论中，可看到以 $\Psi_{c_l}^{(\sigma)}$ 为特征

标的表示就是由子群 H 的不可约表示(σ)诱导出的诱导表示，其用诱导表示的符号为 $\hat{G}(\hat{H}^{(\sigma)}\uparrow)$. 根据第三章的 Frabenius 互易定理，

$$a_{\mu\sigma}=\frac{1}{n_g}\sum_{l\in G}m_l^g\Psi_{c_l}^{(\sigma)}\chi_{c_l}^{(\mu)*}=\frac{1}{n_h}\sum_{l\in H}m_l^h\Psi_l^{(\sigma)}\delta_l^{(\sigma)} \tag{7.4.11}$$

按定义，$a_{\mu\sigma}$为分导表示 $\hat{H}(\hat{G}^{(\mu)}\downarrow)$不可约分解中 H 群不可约表示 σ 出现的重复度，按 Frobenius 互易定理，它等于诱导表示 $\hat{G}(\hat{H}^{(\sigma)}\uparrow)$按 G 群不可约表示分解时不可约表示 μ 出现的重复度，即(7.4.11)式给出的 $a_{\mu\sigma}$.

诱导表示的特征标 $\Psi^{(\sigma)}$满足条件

$$\frac{1}{n_g}\sum_l m_l^g\Psi_l^{(\sigma)}\Psi_l^{(\sigma)*}=\sum_{\mu\mu'}a_{\mu\sigma}a_{\mu'\sigma}\delta_{\mu\mu'}=\sum_l a_{\mu\sigma}^2 \tag{7.4.12}$$

如果知道了子群 H 的全部不可约表示的特征标 $\delta^{(\sigma)}$，就可按(7.4.10)式给出全部诱导表示的特征标 $\Psi^{(\sigma)}$，并由(7.4.11)式计算出 $a_{\mu\sigma}$，因而得到了 G 群不可约表示的一线性方程组. 由于不可约表示特征标是类空间的独立函数，这个方程组的解就给出了 G 群的全部不可约表示的特征标. 这样便得到了由子群不可约表示特征寻求群的不可约表示的方法.

把上述讨论用于置换群，就可由 S_{n-1} 群的特征标通过(7.4.12)式和(7.4.11)式找到 S_n 群的特征标.

7.4.2 一些简单置换群的特征标

有限群不等价不可约表示的数目等于类的数目. 因而，置换群不等价不可约表示的数目，等价于所有可能的循环结构的数目，也等于分割$[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$即 Young 图的数目. 特征标是类的函数，用循环结构标记类，就可造出特征标表. 循环结构记为 n^{ν_n}, $(n-1)^{\nu_{n-1}},\cdots,3^{\nu_3},2^{\nu_2},1^{\nu_1}$，并加以简化，记为$(\nu)=(\nu_1,\nu_2,\cdots,\nu_n)$，对 $\nu_i=0$ 的循环略而不记，只写出 $\nu_i\neq0$ 的循环. 不等价不可约表示的数目等于类的数目，即 Young 图的数目，以 Young 图标记不可约表示(其意义将在后面看出)就可构造出特征标表.

当 S_{n-1}群的特征标得到后，可由(7.4.8)式计算出 S_n 群的混合特征标.

下面就利用上述理论寻求 S_2, S_3, S_4 和 S_5 群的特征标.

1. S_2 群

S_2 群包括两个类，类(1^2)只有一个元素 $e=(1)(2)=\begin{pmatrix}1&2\\1&2\end{pmatrix}$，类(2)只有一个元素 $(1\ 2)=\begin{pmatrix}1&2\\2&1\end{pmatrix}$，它只有两个一维不可约表示：

S_2	(1^2)	(2)
$\chi^{(1)}$	1	1
$\chi^{(2)}$	1	−1

S_n	偶置换	奇置换
$\chi^{(1)}$	1	1
$\chi^{(2)}$	1	−1

所有置换都存在这两个一维不可约表示，即偶置换为 1，奇置换为(−1)，如上所示.

2. S_3 群

S_3 群包括三个共轭元素类，共轭类(1^3)只有一个元素 $e=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 1 & 2 & 3\end{pmatrix}$. 共轭类(2 1)包括三个元素(1 2)，(1 3)，(2 3). 共轭类|(3)|包括两个元素(1 2 3)，(1 3 2). S_3 群与子群 S_2 共轭类的关系为

S_3	(1^3)	(2, 1)	(3)
S_2	(1^2)	(2)	0

S_3 群有三个不可约表示，其中两个一维表示的特征标是知道的：

S_3	(1^3)	(2, 1)	(3)
$\chi^{(1)}$	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	−1	1

只须由 S_2 的特征标利用(7.4.10)和(7.4.11)式求出第三个不可约表示的特征标.

在(7.4.10)式中取不可约表示$(\sigma)=(1)$，可得到由 S_2 群不可约表示得到的混合特征标为

$$\Psi^{(1)}_{(1^3)}=\frac{6}{2}\cdot\frac{1}{1}=3$$

$$\Psi^{(1)}_{(2,1)}=\frac{6}{2}\cdot\frac{1}{3}=1$$

$$\Psi^{(1)}_{(3)}=0$$

上式中 $\Psi^{(1)}$ 表示 S_2 群的不可约表示$\chi^{(1)}$，对类(3)因为这类元素不包括在子群 S_2 中，因而(7.4.10)式中 m^l_α 为0，这里 c_l 为 S_3 群的类(3)，它的元素在 S_2 群 α 类中的数目为0.

由第一章的公式(1.10.8)可计算出(7.4.1)中 S_3 群不可约表示 $D^{(\mu)}(S_3)$对子群 S_2 的分导表示中 S_2 的不可约表示 $D^{(\nu)}(S_2)$，容易得到

$$a_{(1)(1)}=\frac{1}{6}[1\cdot3\cdot1+3\cdot1\cdot1+2\cdot0\cdot1]=1$$

$$a_{(2)(1)}=\frac{1}{6}[1\cdot3\cdot1+3\cdot1\cdot(-1)+2\cdot0\cdot1]=0$$

因而由(7.4.10)式得到

$$a_{(3)(1)}\chi^{(3)}_l=\Psi^{(1)}_l-a_{(1)(1)}\chi^{(1)}_l$$

由此立即可计算出

$$a_{(3)(1)}\chi^{(3)}_{(1^3)}=3-1=2,$$

$$a_{(3)(1)}\chi^{(3)}_{(2,1)}=1-1=0,$$

$$a_{(3)(1)}\chi^{(3)}_{(3)}=0-1=-1$$

当取 $a_{(3),(1)}=1$ 时，得到特征标$\chi^{(3)}_{c_l}$分别为2，0，−1. 这些特征标满足公式

$$\frac{1}{n}\sum_l m_l\chi^{(\mu)}_{c_l}\chi^{(\mu)*}_{c_l}=1 \tag{7.4.12'}$$

因而它们构成不可约表示(3)的特征标，于是 S_3 群的特征标表为

S_3	1 (1^3)	3 $(2,1)$	2 (3)
$\chi^{(1)}$	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	-1	1
$\chi^{(3)}$	2	0	-1

3. S_4 群

S_4 群共轭类(1^4)包括 1 个元素 e，它就是 S_3 群的(1^3)类的元素 e. 类$(2,1^2)$包括 6 个元素，其中 3 个元素$(1\ 2)$，$(1\ 3)$，$(2\ 3)$构成子群 S_3 的$(2\ 1)$类. 类(2^2)包括 3 个元素，这三个元素全不包括在子群 S_3 中，类$(3\ 1)$包括 8 个元素，其中$(1\ 2\ 3)$，$(1\ 3\ 2)$为子群 S_3 的类(3)中的元素.

利用(7.4.10)式由 S_3 群不可约表示$\chi^{(3)}$得到的 S_4 群的混合特征标 $\Psi_i^{(3)}$，它们为

$$\Psi_{(1^4)}^{(3)}=4,\quad \Psi_{(2,1^2)}^{(3)}=2,\quad \Psi_{(2^2)}^{(3)}=0,\quad \Psi_{(3,1)}^{(3)}=1,\quad \Psi_{(4)}^{(3)}=0$$

由(7.4.11)式可计算出 $a_{(1)(1)}=1$，即在混合特征标 $\Psi_i^{(3)}$ 中包括 S_4 群不可约表示(1)一次. 因而，从 $\Psi_1^{(3)}$ 中减去不可约表示(1)的特征标$\chi_i^{(1)}$ 得到一个新的混合特征标为

$$\Psi_{(1^4)}^{(1)}-1=3,\quad \Psi_{(2,1^2)}^{(1)}-1=1,\quad \Psi_{(2^2)}^{(1)}-1=-1,\quad \Psi_{(3,3)}^{(1)}-1=0,\quad \Psi_{(4)}^{(1)}-1=-1$$

由不可约表示特征标的判别式(7.4.12′)对这个混合特征标可得到

$$\frac{1}{24}[1\cdot 3^2+6\cdot 1^2+3\cdot(-1)^2+8\cdot(0)^2+6\cdot(-1)^2]=1$$

这表明这个混合特征标是一个不可约表示的特征标，记这个不可约表示为(4)，它的特征标为

$$\chi^{(4)}:3,\quad 1,\quad -1,\quad 0,\quad -1$$

利用(7.4.10)式可求出由 S_3 群不可约表示(2)得到的混合特征标 $\Psi_i^{(2)}$，它为

$$\Psi_{(2^4)}^{(2)}=4,\quad \Psi_{(2,1^2)}^{(2)}=-2,\quad \Psi_{(2^2)}^{(2)}=0,\quad \Psi_{(3,1)}^{(2)}=1,\quad \Psi_{(4)}^{(2)}=0$$

同样由(7.4.11)式可计算出这个混合特征标中含 S_4 群不可约表示(2)一次，即 $a_{(2)(2)}=1$. 从混合特征标 $\Psi_i^{(2)}$ 中减去$\chi_i^{(2)}$ 得到一个混合特征标

$$\Psi_{(1^4)}^{(2)}-1=3,\quad \Psi_{(2,1^2)}^{(2)}+1=-1,\quad \Psi_{(2^2)}^{(2)}-1=-1,\quad \Psi_{(3,1)}^{(2)}-1=0,\quad \Psi_{(4)}^{(2)}+1=1$$

由不可约表示判别式(7.4.12′)式可判断出这个特征标是不可约表示的特征标，记为$\chi^{(5)}$，即

$$\chi_i^{(5)}:\ 3,\quad -1,\quad -1,\quad 0,\quad 1$$

由 S_3 群不可约表示(3)可得到混合特征标

$$\Psi_{(1^4)}^{(3)}=8,\quad \Psi_{(2,1^2)}^{(3)}=0,\quad \Psi_{(2^2)}^{(3)}=0,\quad \Psi_{(3,1)}^{(3)}=-1,\quad \Psi_{(4)}^{(3)}=0$$

由(7.4.11)式可计算出在这个混合特征标中包括不可约表示(4)和(5)各一次，即 $a_{(4)(3)}=a_{(5)(3)}=1$. 因而，从这个混合特征标中减去$\chi^{(4)}$，$\chi^{(5)}$得到一个混合特征标 2，0，2，-1，0，经判断它也是不可约表示特征标，记为$\chi^{(3)}$，这样便得到了 S_4 群的全部特征标. 下面给出特征标表：

S_4	1 (1^4)	6 $(2,1^2)$	3 (2^2)	8 $(3,1)$	6 (4)
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	-1	1	1	-1
$\chi^{(3)}$	2	0	2	-1	0
$\chi^{(4)}$	3	1	-1	0	-1
$\chi^{(5)}$	3	-1	-1	0	1

4. S_5 群

S_5 群有 7 个共轭类，这些类与子群 S_4 的类之间的关系为

S_5	1 (1^5)	10 $(2,1^3)$	15 $(2^2,1)$	20 $(3,1^2)$	20 $(3,2)$	30 $(4,1)$	24 (5)
S_4	1 (1^4)	6 $(2,1^2)$	3 (2^2)	8 $(3,1)$		6 (4)	

上表中表示类的符号(　)上边的数字是类中包括的元素数.

利用(7.4.10)式计算出 $\Psi_l^{(\sigma)}$ 的混合特征标如下：

σ \ l	(1^5)	$(2,1^3)$	$(2^2,1)$	$(3,1^2)$	$(3,2)$	$(4,1)$	(5)
(1)	5	3	1	2	0	1	0
(2)	5	-3	1	2	0	-1	0
(3)	10	0	2	-2	0	0	0
(4)	15	3	-1	0	0	-1	0
(5)	15	-3	-1	0	0	1	0

由(7.4.12)式可计算出

$$\frac{1}{n_g}\sum_l m_l^g \Psi_l^{(\sigma)}\Psi_l^{(\sigma)} = \sum_\mu a_{\mu\sigma}^2 = \begin{cases} 2 & (\sigma) = (1) \\ 2 & (\sigma) = (2) \\ 2 & (\sigma) = (3) \\ 3 & (\sigma) = (4) \\ 3 & (\sigma) = (5) \end{cases}$$

因而混合特征标 $\Psi_l^{(\sigma)}$ 分别包括 2 个或 3 个不可约表示.

容易计算出 $\Psi_l^{(1)}$ 中包括 $\chi^{(1)}$ 一次 $(a_{(1)(1)}=1)$，因而由 $\Psi_l^{(1)}$ 减去 $\chi^{(1)}$ 得到

$$\chi^{(3)} = \Psi_l^{(1)} - 1 = \{4, 2, 0, 1, -1, 0, -1\}$$

由(7.4.12)式可判断它为不可约表示，记为 $\chi^{(3)}$.

同样可计算出 $\Psi_l^{(2)}$ 包括不可约表示 $\chi^{(2)}$ 一次 $(a_{(1)(1)}=1)$. 于是由这个混合特征标减去 $\chi^{(2)}$ 得到

$$\chi^{(4)} = \Psi_l^{(2)} - \chi^{(2)} = \{4, -4, 0, 1, 1, 0, -1\}$$

由(7.4.12)式可判断它是不可约表示特征标，记为$\chi^{(4)}$.

由(7.4.12)式可计算出 $\Psi_i^{(2)}$ 包括$\chi^{(3)}$一次，于是得到

$$\Psi_i^{(4)}-\chi^{(3)}=\{1,1,1,-1,-1,1,-1,1\}$$

同样可由(7.4.12)式计算出 $\Psi_i^{(5)}$ 中包括$\chi^{(4)}$一次，于是

$$\Psi_i^{(5)}-\chi^{(4)}=\{1,1,-1,-1,-1,-1,1,1\}$$

三个混合特征标 $\Psi_i^{(3)}$，$\Psi_i^{(4)}-\chi^{(3)}$，$\Psi_i^{(5)}-\chi^{(4)}$都是可约表的特征标，而且利用$\chi^{(1)}$，$\chi^{(2)}$，$\chi^{(3)}$和$\chi^{(4)}$可计算出它们中全都不包括$\chi^{(1)}$，$\chi^{(2)}$，$\chi^{(3)}$，$\chi^{(4)}$. 因而，只能是 S_5 群剩下的三个不可约表示特征标$\chi^{(5)}$，$\chi^{(6)}$，$\chi^{(7)}$的混合.

单位元素所对应的特征标是这个不可约表示的维数，因而 S_5 群不可约表示(1)和(2)是1维表示，不可约表示(3)和(4)为4维表示. 以 $\lambda(\nu)$代表不可约表示(ν)的维数，根据有限群全部不等价的不可约表示维数平方和等于群的阶数的定理，可得到

$$\sum_{\nu=1}^{7}\lambda(\nu)^2=120,\quad \sum_{\nu=5}^{7}\lambda(\nu)^2=86$$

由此可解出 $\lambda(5)=\lambda(6)=5$，$\lambda(7)=6$. 通过对不可约表示维数的分析，可得到

$$\chi_i^{(5)}+\chi_i^{(6)}=\Psi_i^{(3)}$$
$$\chi_i^{(5)}+\chi_i^{(7)}=\Psi_i^{(4)}-\chi_i^{(3)}$$
$$\chi_i^{(6)}+\chi_i^{(7)}=\Psi_i^{(5)}-\chi_i^{(4)}$$

由后两个方程可得到

$$\chi_i^{(5)}-\chi_i^{(6)}=\Psi_i^{(4)}-\Psi_i^{(5)}-\chi_i^{(3)}+\chi_i^{(4)}$$
$$=\{0,2,0,0,2,-2,0\}$$

由此可得到不可约表示特征标$\chi^{(5)}$，$\chi^{(6)}$，$\chi^{(7)}$. 下面列出了 S_5 群的特征标表：

S_5	1 (1^5)	10 $(2,1^3)$	15 $(2^2,1)$	20 $(3,1^2)$	20 $(3,2)$	30 $(4,1)$	24 (5)
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	-1	1	1	-1	-1	1
$\chi^{(3)}$	4	2	0	1	-1	0	-1
$\chi^{(4)}$	4	-2	0	1	1	0	-1
$\chi^{(5)}$	5	1	1	-1	1	-1	0
$\chi^{(6)}$	5	-1	1	-1	-1	1	0
$\chi^{(7)}$	6	0	-2	0	0	0	1

利用上述方法由子群 S_{n-1}特征标寻求群 S_n 的特征标，当 n 很大时，是十分麻烦的，下面讨论给出置换群特征标的一般方法.

7.4.3　Frobenius 公式与置换群的特征标

上节对由 S_{n-1}群特征标寻求 S_n 群特征标的特例进行了一些讨论. Frobenius 公式把这一方法一般化了，给出了寻求置换群不可约表示特征标的普遍方法，下面就讨论这一

问题.

任一分割$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$，$\lambda_i(i=1, 2, \cdots, n)$满足条件

$$\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_n=n$$
$$n\geqslant\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n\geqslant 0$$

对于一个循环结构$(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$，由(7.2.5)式给出了$\nu_1, \nu_2, \cdots, \nu_n$与$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$间的关系，可用分割$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$把1，2，…，$n$(即置换对象)分为$n$组：第一组中有$\lambda_1$个数字(置换对象)，第二组中有$\lambda_2$个数，如此等等，第$\lambda_n$组中有$\lambda_n$个数字(各组中没有相同的数字). 它们构成小的置换群S_{λ_i}，$i=1, 2, \cdots, n$. 这些小的置换群的直积构成S_n群的一个子群，记为$S_n^{[\lambda]}$，它为

$$S_n^{[\lambda]}=S_{\lambda_1}\otimes S_{\lambda_2}\otimes\cdots\otimes S_{\lambda_n} \tag{7.4.13}$$

由子群$S_n^{[\lambda]}$的恒等表示出发，在(7.4.10)式中令$\sigma=A$，A为恒等表示即不可约表示(1)，可得到S_n群的一个混合表示的特征标，记为$\Phi_{(\nu)}^{[\lambda]}$，即

$$\Phi_{(\nu)}^{[\lambda]} = \sum_{\mu} a_{\mu A}\chi_{(\nu)l}^{[\mu]} = \frac{n!\cdot m_{(}^{[\lambda]}\nu)}{m_{(\nu)}\cdot n([\lambda])} \tag{7.4.14}$$

上式中$n!$为S_n群的阶，$n([\lambda])$为子群$S_n^{[\lambda]}$的阶，$m_{(\nu)}$为S_n群(ν)类中的元素数，$m_{(\nu)}^{[\lambda]}$为S_n群(ν)类中的元素出现在子群$S_n^{[\lambda]}$中的元素数.

不同的分割$[\lambda]$的数目与S_n群类的数目相同，因而(7.4.14)式给出的混合特征标$\Phi_l^{[\lambda]}$的数目也等于S_n群类的数目，亦即S_n群不等价不可约表示的数目. 实际上这些混合特征标是线性无关的，通过它们的线性组合可得出S_n群由等恒表示A诱导的S_n群诱导表示中所包括的全部不可约表示的特征标. 下面就讨论这个问题.

子群S_{λ_i}的阶为$\lambda_i!$. 因而S_n群的子群$S_n^{[\lambda]}$的阶

$$n([\lambda])=\lambda_1!\lambda_2!\cdots\lambda_n! \tag{7.4.15}$$

在S_n群$(\nu)=(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$所标记的类中，元素数目由(7.2.4)式表示，即

$$m(\nu)=m(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})=\frac{n!}{1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n}\nu_1!\ \nu_2!\cdots\nu_n!}$$

下面讨论S_n群的共轭类$(\nu)=(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$中的$m(\nu)=m(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$个元素出现在子群$S_n^{[\lambda]}$中的数目$m_{(\nu)}^{[h]}$.

(7.4.13)式给出的子群$S_n^{[\lambda]}$是一直积群，直积因子群S_{λ_i}的共轭类为$(1^{\mu_1^i}, 2^{\mu_2^i}, \cdots, n^{\mu_n^i})$，其中$\mu_k^i$满足条件

$$\sum_{k=1}^{n} k\cdot\mu_k^i = \lambda_i \tag{7.4.16}$$

这个共轭类中的元素数为

$$m(\mu_1^i, \mu_2^i, \cdots, \mu_n^i)=\frac{\lambda_i!}{1^{\mu_1^i}2^{\mu_2^i}\cdots n^{\mu_n^i}\mu_1^i!\mu_2^i!\cdots\mu_n^i!}$$

因而$S_n^{[\lambda]}$群的元素具有循环结构$(1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \cdots, n^{\alpha_n})$.

长度为1的循环数为$\sum_{i=1}^{n}\mu_1^i = \alpha_1$；

长度为 2 的循环数为 $\sum_{i=1}^{n}\mu_2^i = \alpha_2$；

长度为 n 的循环数为 $\sum_{i=1}^{n}\mu_n^i = \alpha_n$.

如果

$$\sum_{i=1}^{n}\mu_1^i = \alpha_1 = \nu_1,\ \sum_{i=1}^{n}\mu_2^i = \alpha_2 = \nu_2,\ \cdots,\ \sum_{i=1}^{n}\mu_n^i = \alpha_n = \nu_n \tag{7.4.17}$$

则满足(7.4.16)式的具有循环结构$(1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \cdots, n^{\alpha_n})$的子群 $S_n^{[\lambda]}$ 的元素为 S_n 群中类$(\nu)=(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$的元素. 因而 S_n 群类$(\nu)=(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$中的元素出现在 $S_n^{[\lambda]}$ 群中的数目 $m_{(\nu)}^{[\lambda]}=h(\nu)=h(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$为

$$\begin{aligned} m_{(\nu)}^{[\lambda]} &= h(\nu) = h(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n}) \\ &= \sum_{\mu_1^1\mu_2^1,\cdots,\mu_n^1}\ \sum_{\mu_1^2\mu_2^2,\cdots,\mu_n^2}\cdots\sum_{\mu_1^n\mu_2^n,\cdots,\mu_n^n}\prod_{i=1}^{n}\frac{\lambda_i!}{1^{\mu_1^i}2^{\mu_2^i}\cdots n^{\mu_n^i}\mu_1^i!\mu_2^i!\cdots\mu_n^i!} \end{aligned} \tag{7.4.18}$$

在上述对 μ_i^k 求和中保持条件 $\sum_k k\mu_k^i = \lambda_i$，$\sum_{i=1}^{n}\mu_k^i = \nu_k$，因子

$$\prod_{i=1}^{n}\frac{\lambda_i!}{1^{\mu_1^i}2^{\mu_2^i}\cdots n^{\mu_n^i}\mu_1^i!\mu_2^i!\cdots\mu_n^i!}$$

为子群 S_{λ_i}类$(\mu_1^i, \mu_2^i, \cdots, \mu_n^i)$中的元素数，然后对这个因子中所有满足条件(7.4.16)式的 μ_k^i 求积，就得到了群 S_n 类$(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$中元素在子群 $S_n^{[\lambda]}$ 中出现的总数.

通过上面计算可得到(7.4.14)式给出的 S_n 群的混合特征标

$$\begin{aligned} \Phi_{(\nu)}^{[\lambda]} &= \frac{n!h_{(\nu)}}{n([\lambda])m_{(\nu)}} = \frac{n!}{\lambda_1!\lambda_2!\cdots\lambda_n!}\cdot\frac{1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n}\nu_1!\nu_2!\cdots\nu_n!}{n!} \\ &\quad\cdot\sum_{\substack{\mu_1^1\mu_2^1,\cdots,\mu_n^1\ \mu_1^2\mu_2^2,\cdots,\mu_n^2 \cdots \mu_1^n\mu_2^n,\cdots,\mu_n^n \\ (\sum_k k\mu_k^i=\lambda_i,\ \sum_{i=1}^{n}\mu_k^i=\nu_k)}}\prod_{i=1}^{n}\frac{\lambda_i!}{1^{\mu_1^i}2^{\mu_2^i}\cdots n^{\mu_n^i}\mu_1^i!\mu_2^i!\cdots\mu_n^i!} \\ &= \sum_{\substack{\mu_1^1\cdots\mu_n^1\ \mu_1^2,\cdots,\mu_n^2 \cdots \mu_1^n,\cdots,\mu_n^n \\ (\sum_k k\mu_k^i=\lambda_i,\ \sum_i\mu_k^i=\nu_k)}}\prod_{i=1}^{n}\frac{\nu_i!}{\mu_1^i!\mu_2^i!\cdots\mu_n^i!} \end{aligned} \tag{7.4.19}$$

其中分割$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$，类$(\nu)=(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$.

(7.4.19)式所定义的混合特征标 $\Phi_i^{[\lambda]}$ 实质上是 n 个变量 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 所构成的多项式

$$f_{(\nu)}(x_1, x_2, x_3, \cdots, x_n) = \left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^{\nu_1}\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)^{\nu_2}\cdots\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^n\right)^{\nu_n} \tag{7.4.20}$$

的展开系数. 把 $\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^k\right)^{\nu_k}$ 展开为

$$\left(\sum_i x_i^k\right)^{\nu_k} = \sum_{\substack{\mu_k^1\mu_k^2,\cdots,\mu_k^n \\ (\sum_i\mu_k^i=\nu_k)}}\frac{\nu_k!}{\mu_k^1!\mu_k^2!\cdots\mu_k^n!}x_1^{k\mu_k^1}x_2^{k\mu_k^2}\cdots x_n^{k\mu_k^n}$$

于是得到

$$
\begin{aligned}
&f_{(\nu)}(x_1, x_2, x_3, \cdots, x_n) \\
&= \left(\sum_i x_i\right)^{\nu_1}\left(\sum_i x_i^2\right)^{\nu_2}\cdots\left(\sum_i x_i^n\right)^{\nu_n} \\
&= \sum_{\mu_1^1, \cdots, \mu_1^n}\ \sum_{\substack{\mu_2^1, \cdots, \mu_2^n \\ (\sum_i k\mu_k^i = \nu_k)}} \cdots \sum_{\mu_n^1, \cdots, \mu_n^n} \frac{\nu_2!}{\mu_1^1!\mu_1^2!\cdots\mu_1^n!}\cdot\frac{\nu_2!}{\mu_2^1!\mu_2^2!\cdots\mu_2^n!} \\
&\qquad \vdots \\
&\quad \cdots \frac{\nu_n!}{\mu_n^1!\mu_n^2!\cdots\mu_n^n!} x_1^{\mu_1^1+2\mu_2^1+\cdots+n\mu_n^1} x_2^{\mu_1^2+2\mu_2^2+\cdots+n\mu_n^2}\cdots x_n^{\mu_1^n+2\mu_2^n+\cdots+n\mu_n^n}
\end{aligned}
$$

其中 $\sum_{k=1}^{n} k\mu_k^i = \lambda_i$，于是系数后面的因子为 $x_1^{\lambda_1}$，$x_2^{\lambda_2}$，$\cdots$，$x_n^{\lambda_n}$.

$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$对应一个分割，而这个因子前边的系数恰是(7.4.19)式表示的$\Phi_l^{[\lambda]}$，因而上式为

$$
f_{(\nu)}(x_1, x_2, x_3, \cdots, x_n) = \sum_{[\lambda]} \Phi_{(\nu)}^{[\lambda]} \sum_P{}' P x_1^{\lambda_1} x_2^{\lambda_2}\cdots x_n^{\lambda_n} \tag{7.4.21}
$$

上式中对$[\lambda]$求和，求遍 S_n 群的全部分割，P 为 S_n 群的置换. 当很多个置换 p 使 $x_1^{\lambda_1}x_2^{\lambda_2}$，$\cdots$，$x_n^{\lambda_n}$ 相同时，即

$$
P_1x_1^{\lambda_1}x_2^{\lambda_2}, \cdots, x_n^{\lambda_n} = P_2x_1^{\lambda_1}x_2^{\lambda_2}, \cdots, x_n^{\lambda_n} = \cdots
$$

只取一项 $P_1x_1^{\lambda_1}x_2^{\lambda_2}\cdots x_n^{\lambda_n}$，因而(7.4.21)式求和号 $\sum\limits_P$ 上打撇表示对相同的结果的置换只取一项.

公式(7.4.21)借助函数$f_{(\nu)}(x_1, x_2, \cdots, x_n)$的多项式展开系数给出了混合特征标$\Phi_{(\nu)}^{[\lambda]}$，因而使混合特征标有了统一的表达式，实际上是上一节对任意 S_n 群的扩展.

下面以 S_4 群为例具体讨论由(7.4.21)式得到的混合特征标 $\Phi_{(\nu)}^{[\lambda]}$. S_4 群有 5 个类，(1^4)，(2^2)，$(2, 1^2)$，$(3, 1)$和(4). 由它们定义 5 种$f_{(\nu)}(x_1, x_2, x_3, x_4)$：

$$
f_{(1^4)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \left(\sum_{i=1}^{4} x_i\right)^4
$$

$$
f_{(2,1^2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \left(\sum_{i=1}^{4} x_i\right)^2\left(\sum_{i=1}^{4} x_i^2\right)
$$

$$
f_{(2^2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \left(\sum_{i=1}^{4} x_i^2\right)^2
$$

$$
f_{(3,1)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \left(\sum_i x_i\right)\left(\sum_i x_i^3\right)
$$

$$
f_{(4)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \left(\sum_i x_i^4\right)
$$

如$f_{(4)}$可写为

$$
f_{(4)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \Phi_{(4)}^{[4]} \sum_P{}' P x_1^4 x_2^0 x_3^0 x_4^0 = \sum_i x_i^4
$$

因而 $\Phi_{(4)}^{[4]} = 1$，$\Phi_{(4)}^{[3,1]} = \Phi_{(4)}^{[2,1^2]} = \Phi_{(4)}^{[2,2]} = \Phi_{(4)}^{[1^4]} = 0$.

其它四个多项展开为

$$f_{(1^4)} = \sum_P{}' Px_1^4x_2^0x_3^0x_4^0 + 4\sum_P{}' Px_1^3x_2^1x_3^0x_4^0 + 6\sum_P{}' Px_1^2x_2^2x_3^0x_4^0$$
$$+ 12\sum_P{}' Px_1^2x_2^1x_3^1x_4^0 + 24\sum_P{}' Px_1^1x_2^1x_3^1x_4^1$$
$$f_{(21^2)} = \sum_P{}' Px_1^4x_2^0x_3^0x_4^0 + 2\sum_P{}' Px_1^3x_2^1x_3^0x_4^0$$
$$+ 2\sum_P{}' Px_1^2x_2^2x_3^0x_4^0 + 2\sum_P{}' Px_1^2x_2^1x_3^1x_4^0$$
$$f_{(2^2)} = \sum_P{}' Px_1^4x_2^0x_3^0x_4^0 + 2\sum_P{}' Px_1^2x_2^2x_3^0x_4^0$$
$$f_{(3,1)} = \sum_P{}' Px_1^4x_2^0x_3^0x_4^0 + \sum_P{}' Px_1^3x_2^1x_3^0x_4^0$$

由此得到的全部 $\Phi_{(\nu)}^{[4]}$ 列于下表：

S_4 群 $\Phi_{(\nu)}^{[4]}$ 表

$[\lambda]$ \ (ν)	1 (1^4)	6 (21^2)	3 (2^2)	8 (31)	6 (4)
[4]	1	1	1	1	1
[31]	4	2	0	1	0
$[2^2]$	6	2	2	0	0
$[21^2]$	12	2	0	0	0
$[1^4]$	24	0	0	0	0

对于任意 S_n 群，可通过对一定循环结构 $(\nu) = (1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \cdots, n^{\nu_n})$ 定义的函数 $f_{(\nu)}(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 的多项式展开，由(7.4.21)式得到混合特征标 $\Phi_{(\nu)}^{[\lambda]}$，由它们的线性组合求出由 A 诱导出的诱导表示中所包括的全部不等价不可约表示的特征标 $\chi_{(\nu)}^{[\lambda]}$.

由(7.4.10)式定义的一般的诱导表示特征标出发，可进一步得到 S_n 群不可约表示特征标 $\chi_{(\nu)}^{[\lambda]}$ 与多项式展开系数的一般关系，这是由 Frobenius 完成的. 可由定义的 Frobenius 函数完成，最后得到不可约表示特征标 $\chi_{(\nu)}^{[\lambda]}$ 为 Frobenius 函数多项式展开的系数，下面给出这一重要结果.

定义多项式

$$D(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \prod_{i<j}(x_i - x_j) = \sum_P (-1)^P Px_1^{n-1}x_2^{n-2}\cdots x_{n-1}x_n^0 \quad (7.4.22)$$

其中，当 P 为偶置换时，$(-1)^P = 1$；当 P 为奇置换时，$(-1)^P = -1$. 定义函数

$$F_{(\nu)}(x_1, x_2, \cdots, x_n) = f_{(\nu)}(x_1, x_2, \cdots, x_n)D(x_1, x_2, \cdots, x_n) \quad (7.4.23)$$

称为 Frobenius 函数. 它的多项式展开为

$$F_{(\nu)}(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \sum_{[\lambda]}\chi_{(\nu)}^{[\lambda]}\sum_P (-1)^P Px_1^{\lambda_1+n-1}x_2^{\lambda_2+n-2}\cdots x_{n-1}^{\lambda_{n-1}+1}x_n^{\lambda_n} \quad (7.4.24)$$

其中的展开系数 $\chi_{(\nu)}^{[\lambda]}$ 为以 $[\lambda]$ 标记的不可约表示的 (ν) 类的特征标.

定理 7.4.1(Frobenius 定理)　Frobenius 函数 $F_{(\nu)}(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 的多项式展开(7.4.24)式，式中的系数 $\chi_{(\nu)}^{[\lambda]}$ 为置换群 S_n 的以分割 $[\lambda]$ 标记的不可约表示特征标的 (ν) 类的

特征标分量，它满足不可约表示特征标的条件

$$\sum_{(\nu)} m(\nu) \mid \chi_{(\nu)}^{[\lambda]} \mid^2 = n! \tag{7.4.25}$$

其中 $n!$ 为群 S_n 的阶，$m(\nu)$ 为 (ν) 类中元素数目.

这个定理证明比较麻烦，这里就不给出了. 读者可参阅 M. Hamermesh 著"Group Theory and Its Application To Physical Problems".

7.5 置换群不可约表示特征标与标准 Young 盘

7.2 节中讨论的由分割得到的 Young 图，对置换群(以至酉群)的表示理论有重要作用，在这节中将在 Frobenius 函数的基础上，把置换群不可约表示特征标与 Young 盘(Young tableau)联系起来，从而给出讨论置换群表示理论的重要的图形方法.

7.5.1 标准 Young 盘与置换群不可约表示的维数

1. 标准 Young 盘

n 个数的不同分割与置换群 S_n 类的数目相同，因而可用分割，也就是用代表分割的 Young 图来标记置换群 S_n 的不可约表示. 在(7.4.24)式中，已把用分割亦即 Young 图 $[\lambda]$ 标记的置换群的特征标 $\chi_i^{[\lambda]}$ 表示为 Frobenius 函数的多项式展开系数，下面讨论在 Young 图基础上定义的 Young 盘和标准 Young 盘，以及它们与不可约表示维数的关系.

对于包括 n 个方块的任一 Young 图，都可在它的 n 个方块上任意填充 $1, 2, \cdots, n$ 个数字，称这种填充上任意 $1, 2, \cdots, n$ 个数字的 Young 图为 Young 盘. 任一 Young 图都可由 n 个数字的不同填充而得到 $n!$ 个 Young 盘.

如果 Young 盘上填充的数字满足条件：*a*) Young 盘上每一行所填的数字是从左到右逐渐增加的；*b*) 每一列上的数字是从上到下逐渐增加的. 则称为标准 Young 盘，并以 $T_i^{[\lambda]}$ 标记这个标准 Young 盘，$[\lambda]$ 为 Young 盘所属的 Young 图，i 为这个标准 Young 盘在一定 Young 图 $[\lambda]$ 所产生的若干个标准 Young 盘中的编序，编序的原则是逐行从左起比较两个标准 Young 盘上所填充的数字，当它们的数字第一次出现不同时，较小数字的 Young 盘编号小(在前边)，较大数字的 Young 盘编号大(在后边)，称这种编序为字典顺序，简记为 *D. O* 顺序.

下面作为例子给出了 S_4 的标准 Young 盘：

$$\underset{T_1^{[4]}}{\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline\end{array}} \quad \underset{T_1^{[31]}}{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}} \quad \underset{T_2^{[31]}}{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}} \quad \underset{T_3^{[31]}}{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}} \quad \underset{T_1^{[2^2]}}{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array}}$$

$$\underset{T_2^{[2^2]}}{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&4\\\hline\end{array}} \quad \underset{T_1^{[21^2]}}{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1} 4\\\cline{1-1}\end{array}} \quad \underset{T_2^{[21^2]}}{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1} 4\\\cline{1-1}\end{array}} \quad \underset{T_3^{[21^2]}}{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2\\\cline{1-1} 3\\\cline{1-1}\end{array}} \quad \underset{T_1^{[1^4]}}{\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline 4\\\hline\end{array}}$$

2. 置换群 S_n 不可约表示$[\lambda]$的维数 $d([\lambda])$

一切有限群，不可约表示的维数都等于单位元素对于这个表示的特征标. 置换群单位元素属于类$(\nu)=(1^n)$（这个类只有单位元一个元素），因而由定理 7.4.1 得到

$$F_{(1^n)}(x_1x_2,\cdots,x_n)=\sum_{[\lambda]}d([\lambda])\sum_P(-1)^P Px_1^{\lambda_1+n-1}x_2^{\lambda_2+n-2}\cdots x_{n-1}^{\lambda_{n-1}+1}x_n^{\lambda_n}\quad(7.5.1)$$

其中不可约表示$[\lambda]$的维数 $d([\lambda])$等于属于类$(\nu)=(1^n)$的单位元素的特征标$\chi^{[\lambda]}_{(1^n)}$. 由(7.4.22)式和(7.4.20)式得到相应的 Frobenius 函数 $F_{(1^n)}$为

$$F_{(1^n)}(x_1x_2,\cdots,x_n)=\left(\sum_{i=1}x_i\right)^n\sum_P(-1)^P Px_1^{n-1}x_2^{n-2}\cdots x_{n-1}^1x_n^0\qquad(7.5.2)$$

因而不可约表示维数 $d([\lambda])$满足方程

$$\begin{aligned}&\left(\sum_{i=1}x_i\right)^n\sum_P(-1)^P Px_1^{n-1}x_2^{n-2}\cdots x_{n-1}^1x_n^0\\&=\sum_{[\lambda]}d([\lambda])\sum_P(-1)^P Px_1^{\lambda_1+n-1}x_2^{\lambda_2+n-2}\cdots x_n^{\lambda_n}\end{aligned}\qquad(7.5.3)$$

下面不做严格的证明，由(7.5.3)式计算不可约表示维数 $d([\lambda])$的图形方法.

(7.5.3)式左端实际是

$$\begin{aligned}&\left(\sum_i x_i\right)^n\sum_P(-1)^P Px_1^{n-1}x_2^{n-2}\cdots x_n^0\\&=\left(\sum_i x_i\right)\left(\sum_i x_i\right)\cdots\left(\sum_i x_i\right)\sum_P(-1)^P x_1^{n-1}x_2^{n-2}\cdots x_n^0\end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned}&\sum_i x_i\sum_P(-1)^P Px_1^{n-1}x_2^{n-2}\cdots x_n^0\\&=\sum_P(-1)^P P[x_1^nx_2^{n-2}\cdots x_n^0+x_1^{n-1}x_2^{n-1}x_3^{n-1}\cdots x_n^0+\cdots+x_1^{n-1}x_2^{n-2}\cdots x_n^1]\\&=\sum_P(-1)^P Px_1^nx_2^{n-2}\cdots x_n^0\end{aligned}$$

因为后面的其它项都包括$\cdots x_i^{n-i}x_{i+1}^{n-i}\cdots$，这些项用置换 P 求和后为零，即置换求和后出现$[\cdots x_i^{n-i}x_{i+1}^{n-i}\cdots-\cdots x_i^{n-i}x_{i+1}^{n-i}\cdots]$项，它们相互抵消. 因而在(7.5.3)式右端的计算中第 k 个$\left(\sum_i x_i\right)$ 与之相乘时，只须保留由第$(k-1)$次相乘后得到的不为零的项. 因而在多项式展开

$$\left(\sum_i x_i\right)^n\sum_{\substack{\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n\\ \sum_i\lambda_i=n}}\frac{n!}{\lambda_1!\lambda_2!\cdots\lambda_n!}x_1^{\lambda_1}x_2^{\lambda_2}\cdots x_n^{\lambda_n}$$

中，必须把对一定 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 而得到的$\dfrac{n!}{\lambda_1!\lambda_2!\cdots\lambda_n!}$个项，由 λ_1 个 x_1，λ_2 个 x_2，…，λ_n 个 x_n 写为 x_i 的排列$[x_{i_1},x_{i_2},\cdots,x_{i_n}]$，其中包括 λ_i 个 x_i 与用$\left(\sum_i x_i\right)$乘$\sum_P(-1)^P P(\cdots)$ 只有 $x_1\sum_P(-1)^P P(\cdots)$ 不为零的分析相似，可得到在展开式

$$\left(\sum_i x_i\right)^n\sum_{\substack{\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n\\ \sum_i\lambda_i=n}}\frac{n!}{\lambda_1!\lambda_2!\cdots\lambda_n!}x_1^{\lambda_1}x_2^{\lambda_2}\cdots x_n^{\lambda_n}$$

中只有满足相似条件

$$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \geqslant 0 \tag{7.5.4}$$

的项乘 $\sum_P (-1)^P P(\cdots)$ 才不为零，否则为零. 这一点很容易看到，比如 $\lambda_{i-1} > \lambda_i$，在相乘后 $\sum_P (-1)^P P(\cdots)$ 中一定出现 $\cdots x_k^{n-k+\lambda_k} \cdots x_{i+1}^{n-i-1+\lambda_{i+1}} \cdots$ 的项，其中 $n-k+\lambda_k = n-i-1+\lambda_i$，因而置换求和后为零. 于是(7.5.3)式可表示为

$$
\begin{aligned}
&\left(\sum_i x_i\right)^n \sum_P (-1)^P P x_1^{n-1} x_2^{n-2} \cdots x_{n-1}^1 x_n^0 \\
&= \sum_{\substack{\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \\ \sum_i \lambda_i = n}} \sum_P (-1)^P P x_1^{n-1} x_2^{n-2} \cdots x_{n-1}^1 x_n^0 \\
&= \sum_{[\lambda]} \left[\frac{n!}{\lambda_1! \lambda_2! \cdots \lambda_n!} \text{项的各种顺序排列的 } x_1^{\lambda_1} x_2^{\lambda_2} \cdots x_n^{\lambda_n} \right] \\
&\quad \cdot \sum_P (-1)^P P x_1^{n-1} x_2^{n-2} \cdots x_{n-1}^1 x_n^0 \\
&= \sum_{[\lambda]} d([\lambda]) \sum_P (-1)^P P x_1^{\lambda_1+n-1} x_2^{\lambda_2+n-2} \cdots x_{n-1}^{\lambda_{n-1}+1} x_n^{\lambda_n}
\end{aligned} \tag{7.5.5}
$$

满足条件 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \lambda_n \geqslant 0$，$\sum_i \lambda_i = n$ 即为一个分割 $[\lambda] = [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$，因而(7.5.5)式左端求和也可表示为对 $[\lambda]$ 求和，于是(7.5.5)式中利用了对 $[\lambda]$ 的求和. 因而由(7.5.5)式求不可约表示 $[\lambda]$ 的维数问题就归结为对一定分割 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$，$\frac{n!}{\lambda_1!\lambda_2!\cdots\lambda_n!}$ 个 $x_1^{\lambda_1} x_2^{\lambda_2} \cdots x_n^{\lambda_n}$ 的各种有序排列中哪些乘 $\sum_P (-1)^P P(\cdots)$ 不为零的问题.

为了说明这个问题以 $n=3$ 为例：

$$
\begin{aligned}
\left(\sum_i x_i\right)^3 &= \sum_{\substack{\lambda_1\lambda_2\lambda_3 \\ \lambda_1+\lambda_2+\lambda_3=3}} \frac{6}{\lambda_1!\lambda_2!\cdots\lambda_3!} x_1^{\lambda_1} x_2^{\lambda_2} x_3^{\lambda_3} \\
&= \underset{\lambda_1=3}{x_1^3} + \underset{\lambda_2=3}{x_2^3} + \underset{\lambda_3=3}{x_3^3} + (\underbrace{x_3x_2x_1 + x_3x_1x_2 + x_2x_3x_1 + x_2x_1x_3 + x_1x_2x_3 + x_1x_3x_2}_{\lambda_1=\lambda_2=\lambda_3=1}) \\
&\quad + (\underbrace{x_2x_1x_1 + x_1x_2x_1 + x_1x_1x_2}_{\lambda_1=2,\ \lambda_2=1}) + (\underbrace{x_2x_2x_1 + x_1x_2x_2 + x_2x_1x_2}_{\lambda_1=1,\ \lambda_2=2}) \\
&\quad + (\underbrace{x_3x_1x_1 + x_1x_3x_1 + x_1x_1x_3}_{\lambda_1=2,\ \lambda_3=1}) + (\underbrace{x_3x_3x_1 + x_3x_1x_3 + x_1x_3x_3}_{\lambda_1=1,\ \lambda_3=2})
\end{aligned}
$$

由 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \lambda_3 \geqslant 0$ 的限制，在上述展开式中只有 $\lambda_1=3$，$\lambda_1=\lambda_2=\lambda_3=1$ 和 $\lambda_1=2$，$\lambda_2=1$ 的展开对(7.5.5)式有贡献，即

$$
\begin{aligned}
&\left(\sum_i x_i\right)^3 \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0 \\
&= [x_1^3 + (x_3x_2x_1 + x_3x_1x_2 + x_2x_3x_1 + x_2x_1x_3 + x_1x_2x_3 + x_1x_3x_2) \\
&\quad + (x_2x_1x_1 + x_1x_2x_1 + x_1x_1x_2)] \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0
\end{aligned}
$$

容易看到

$$[x_3x_2x_1 + x_2x_3x_1 + x_2x_1x_3 + x_1x_2x_3 + x_1x_3x_2 + x_3x_1x_2] \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0$$

$$= \sum_P (-1)^P P x_1^3 x_2^2 x_3^1 + x_2 x_3 \sum_P (-1)^P P x_1^3 x_2^1 x_3^0$$

$$[x_2 x_1 x_1 + x_1 x_2 x_1 + x_1 x_1 x_2] \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0$$

$$= \sum_P (-1)^P P x_1^4 x_2^3 x_3^0 + x_1 x_2 \sum_P (-1)^P P x_1^3 x_1^1 x_3^0$$

$$= 2 \sum_P (-1)^P P x_1^4 x_2^3 x_3^0$$

$$x_1^3 \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0 = \sum_P (-1)^P P x_1^5 x_2^1 x_3^0$$

即

$$x_2 x_3 x_1 \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0 = x_2 x_1 x_3 \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0$$

$$= x_3 x_1 x_2 \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0 = x_2 x_3 x_1 \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0$$

$$= x_2 x_1 x_3 \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0 = x_1 x_1 x_2 \sum_P (-1)^P P x_1^2 x_2^1 x_3^0$$

$$= 0$$

这个例子说明一个规律，即对 λ_1 个 x_1，λ_2 个 x_2，…，λ_n 个 x_n 排列成的编号为 1，2，…，n. 把这 n 个号码按如下规则填入不可约表示 $[\lambda]$ 对应的 Young 图中，填入规则为：把 λ_1 个 x_1 的编号按在排列中出现的由右到左的顺序填入 Young 图的第一行中，把 λ_2 个 x_2 同样按顺序填入第二行中，把 λ_i 个 x_i 的编号按顺序填入第 i 行中，直至把 λ_n 个 x_n 的编号按顺序填入 λ_n 行中. 这样就得到一个 Young 盘. 如果有序排列的 Young 盘是标准 Young 盘，则与 $\sum_P (-1)^P P(\cdots)$ 相乘结果非零，即

$$\sum_P (-1)^P P x_1^{n-1} x_2^{n-2} \cdots x_n^0 = \sum_P (-1)^P P x_1^{\lambda_1+n-1} x_2^{\lambda_2+n-2} \cdots x^{\lambda_n}$$

如果排列的 Young 盘不是标准 Young 盘，则 $\sum_P (-1)^P P(\cdots)$ 相乘为零.

在上例中给出非零结果的排列的 Young 盘为

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}$$

而给出零结果的排列的 Young 盘为

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 2&3\\\hline 1\\\cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 3\\\hline 2\\\hline\end{array} \qquad \begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 3\\\hline 1\\\hline\end{array} \qquad \begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 1\\\hline 3\\\hline\end{array} \qquad \begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 3\\\hline 2\\\hline\end{array} \qquad \begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 3\\\hline 1\\\hline\end{array}$$

全是非标准 Young 盘，完全符合所给的规则.

反之，对任何 Young 图的一个 Young 盘都可由它定出一个由 n 个 x_i 组成的有序排列. 如 S_4 群不可约表示 $[31]$ 的 3 个标准 Young 盘，它们所代表的 4 个 x_i 的排列为

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$$

$$x_2 x_1 x_1 x_1 \qquad\qquad x_1 x_2 x_1 x_1 \qquad\qquad x_1 x_1 x_2 x_1$$

它们都给出非零结果，而非标准 Young 盘 $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 2&3&4\\\hline 1\\\cline{1-1}\end{array}$ 代表排列 $x_1x_1x_1x_2$，它给出零结果. 它们对应于 $(\sum_i x_i)^4$ 展开中 $\lambda_1=3$，$\lambda_2=1$ 的$\frac{4!}{3!}x_1^3x_1$ 的四种有序排列.

这说明任何由 λ_1 个 x_1，λ_2 个 x_2，…，λ_n 个 x_n 组成的 $x_1^{\lambda_1}x_2^{\lambda_2}\cdots x_n^{\lambda_n}$ 的任何一种有序排列都唯一地对应于不可约表示$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$的 Young 盘中的一个. 反之，任何一个 Young 盘都唯一地对应一个有序排列. $\sum_i \lambda_i=n$ 的 Young 图虽然有 $n!$个 Young 盘，但是对于 λ_1 个 x_1，λ_2 个 x_2，…，λ_n 个 x_n 的排列，由于在这 $n!$个 Young 盘中对 x_i 的 λ_i 个编序互交换，所以排列是不变的，因而独立的 Young 盘只有

$$\frac{n!}{\lambda_1!\lambda_2!\cdots\lambda_n!}$$

个，因而多项式 $(\sum_i x_i)^n$ 的展开可表示为

$$\begin{aligned}(\sum_i x_i)^n &= \sum_{\substack{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\\ \sum_i\lambda_i=0}} \frac{n!}{\lambda_1!\lambda_2!\cdots\lambda_n!}x_1^{\lambda_1}x_2^{\lambda_2}\cdots x_n^{\lambda_n}\\ &= \sum_{[\lambda]_i}(x_1, x_2, \cdots, x_n)_i + \sideset{}{'}\sum_{\substack{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\\ \sum_i\lambda_i=n}} \frac{n!}{\lambda_1!\lambda_2!\cdots\lambda_n!}x_1^{\lambda_1}x_2^{\lambda_2}\cdots x_n^{\lambda_n}\end{aligned}$$

上式中 $\sideset{}{'}\sum_{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n}$ 表示对不满足条件 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n\geqslant0$，而满足条件 $\sum_i\lambda_i=n$ 的求和，$(x_1\cdots x_k\cdots x_j)_i$ 代表由第 i 个 Young 盘表示的有序排列. 因而

$$\begin{aligned}&(\sum_i^n x_i)^n\cdot\sum_P(-1)^P Px_1^{n-1}x_2^{n-2}\cdots x_n^0\\ &=\sum_{[\lambda]}\sum_i\overline{(x_1x_2\cdots x_k)_i}\cdot\sum_P(-1)^P Px_1^{n-1}x_2^{n-2}\cdots x_n^0\\ &=\sum_\lambda C([\lambda])\sum_P(-1)^P Px_1^{\lambda_1+n-1}x_2^{\lambda_2+n-2}\cdots x^{\lambda_n}\end{aligned}\tag{7.5.6}$$

比如第 i 号 Young 盘所代表的有序排列为

$$[x_{i_1}^n, x_{i_2}^{n-1}, \cdots, x_{i_{n-1}}^2, x_{i_n}^1]_i$$

i_j 为 1, 2, 3, …, n，上角标为排列编号，当以[$\;$]$_i$ 乘 $\sum_P(-1)^P P(\quad)$，只有相乘的每一步 $\sum_P(-1)^P P(\quad)$ 之内都不出现相同幂次的项，对 P 的求和才不为 0，否则为 0. 因而

$$\begin{aligned}&x_{i_1}^n x_{i_2}^{n-1}\cdots x_{i_{n-2}}^3 x_{i_{n-1}}^2 x_{i_n}^1\sum_P(-1)^P Px_1^{n-1}x_2^{n-2}x_3^{n-3}\cdots x_n^0\\ &=\begin{cases}x_{i_1}^n x_{i_2}^{n-1}\cdots x_{i_{n-2}}^3 x_{i_{n-1}}^2\sum_P(-1)^P Px_1^n x_2^{n-2}x_3^{n-3}\cdots x_n^0, & \text{当 } x_{i_n}'=x_1 \text{ 时}\\ 0, & \text{当 } x_{i_n}'\neq x_1 \text{ 时}\end{cases}\end{aligned}$$

$$x_{i_1}^n x_{i_2}^{n-1} \cdots x_{i_{n-2}}^3 x_{i_{n-1}}^2 \sum_P (-1)^P P x_1^n x_2^{n-2} x_3^{n-3} \cdots x_n^0$$

$$= \begin{cases} x_{i_1}^n x_{i_2}^{n-1} \cdots x_{i_{n-2}}^3 \sum_P (-1)^P P \begin{cases} x_1^{n+1} x_2^{n-1} \cdots x_n^0, & \text{当 } x_{i_{n-1}}^2 = x_1 \text{ 时} \\ x_1^n x_2^{n-1} \cdots x_n^0, & \text{当 } x_{i_{n-1}}^2 = x_2 \text{ 时} \end{cases} \\ 0, \quad \text{当 } x_{i_{n-1}}^2 \neq x_1, \ x_{i_{n-1}}^2 \neq x_2 \text{ 时} \end{cases}$$

如此讨算下去可以得到只有标准 Young 盘所描述的排列可得到非零的结果，即

$$[x_{i_1}^n x_{i_2}^{n-1} \cdots x_{i_n}^1] \sum_P (-1)^P P x_1^{n-1} x_2^{n-2} \cdots x_n^0$$

$$= \begin{cases} \sum_P (-1)^P P x_1^{\lambda_1+n-1} x_2^{\lambda_2+n-2} \cdots x_n^{\lambda_n}, & \text{当[ ]}_i \text{ 为标准 Young 盘标记的排列} \\ 0, & \text{当[ ]}_i \text{ 不是标准 Young 盘标记的排列} \end{cases}$$

于是得到

$$\left(\sum_i^n x_i\right)^n \cdot \sum_P (-1)^P P x_1^{n-1} x_2^{n-2} \cdots x_n^0$$

$$= C([\lambda]) \sum_P (-1)^P P x_1^{\lambda_1+n-1} x_2^{\lambda_2+n-2} \cdots x_n^{\lambda_n}$$

$C([\lambda])$为表示$[\lambda]$的标准 Young 盘数. 这便得到了一种记算不可约表示维数$d([\lambda])$的图形方法，不可约表示维数 $d([\lambda])$等于不可约表示$[\lambda]$的标准 Young 盘数.

定理 7.5.1　置换群 S_n 不可约表示维数 $d([\lambda])$等于由 Young 图$[\lambda]$所得到的标准 Young 盘的数目.

这个定理的严格证明和前面讨论的详细情况，可参阅 Rultherford 著“Substionel Analysis”.

置换群 S_n 不可约表示$[\lambda]=[\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n]$的维数 $d([\lambda])$也可由下面的解析公式表示：

$$d([\lambda]) = n! \frac{1}{l_1! l_2! \cdots l_n!} \prod_{i<k}^m (l_i - l_k) \tag{7.5.7}$$

其中

$$l_i = \lambda_i + m - i$$

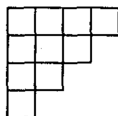
m 为$[\lambda]=[\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_m 00\cdots 0]$中不为 0 的 λ_i 的数目，其中 $\prod_{i<k}(l_i - l_k)$ 也可表示为行列式

$$\prod_{i<k}(l_i - l_k) = D(l_1, l_2, \cdots, l_n) = \begin{vmatrix} 1 & l_1 & l_1^2 & \cdots & l_1^n \\ 1 & l_2 & l_2^2 & \cdots & l_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & l_n & l_n^2 & \cdots & l_n^n \end{vmatrix}$$

置换群 S_n 不可约表示维数还存在另一种解析表达式（一般称为 Robinson 公式）：

$$d([\lambda]) = \frac{n!}{\prod_{i,j} g_{ij}} \tag{7.5.8}$$

其中g_{ij}称为“钩长”或“曲矩”(hook length)，Young 图[λ]第i行第j列那个方块的钩长(或曲矩)等于从这个方块出发在第i行上向右数得到的方格数加上从这个方块下面的方块出发在第j列上向下数的方块数之和. 例如 Young 图[4321]的钩长为



$$g_{11}=7,\quad g_{12}=5,\quad g_{13}=3,\quad g_{14}=1$$
$$g_{21}=5,\quad g_{22}=3,\quad g_{23}=1$$
$$g_{31}=3,\quad g_{32}=1,\quad g_{41}=1$$

S_{10}群不可约表示[4321]的维数由 Robinson 公式得到

$$d([4321])=10!/7531531311=16$$

因而 Robinson 公式在计算置换群维数时是方便的.

7.5.2 置换群 S_n 的不可约表示特征标

由 Frobenius 定理

$$\left(\sum_i x_i\right)^{\nu_1}\left(\sum_i x_i^2\right)^{\nu_2}\cdots\left(\sum_i x_i^n\right)^{n}\sum_P(-1)^P P x_1^{n-1}x_2^{n-2}\cdots x_n^0$$
$$=\sum_{[\lambda]}\chi_i^{[\lambda]}\sum_P(-1)^P P x_1^{\lambda_1+n-1}x_2^{\lambda_2+n-2}\cdots x_n^{\lambda_n}.$$

使用上节中的分析，原则上可记算出各种不可约表示的特征标. 而且在计算中可借助标准 Young 盘标记$\left(\sum_i x_i\right)^{\nu_1}\left(\sum_i x_i^2\right)^{\nu_2}\cdots\left(\sum_i x_i^n\right)^{\nu_n}$展开中各种满足非零条件的因子，把特征标$\chi_{(\nu)}^{[\lambda]}$表示为各种 Young 图之代数和. 但实际计算是十分麻烦的，这里就不进行一般讨论了.

置换群的两个一维不可约表示[n]和[1^n]的特征标由 Frobenius 公式很容易得到. 不可约表示[n]的特征标为

$$\chi_{(\nu)}^{[n]}=1$$

也就是恒等表示. 而不可约表示[1^n]的特征标为

$$\chi_{(\nu)}^{[1^n]}=\begin{cases}1, & \text{当}(\nu)\text{为偶置换类}\\ -1, & \text{当}(\nu)\text{为奇置换类}\end{cases}$$

下面给出了一些置换群的特征标表：

$S_3\sim S_6$ 的特征标表

$n=3$

分割 \ 类	1 (1^3)	3 (1,2)	2 (3)
[3]	1	1	1
[2,1]	2	0	−1
[1^3]	1	−1	1

$n=4$

分割 \ 类	1 (1^4)	6 (1^2,2)	8 (1,3)	3 (2^2)	6 (4)
[4]	1	1	1	1	1
[3,1]	3	1	0	−1	−1
[2^2]	2	0	−1	2	0
[2,1^2]	3	−1	0	−1	1
[1^4]	1	−1	1	1	−1

$n=5$

类 / 分割	1 (1^5)	10 $(1^3,2)$	20 $(1^2,3)$	15 $(1,2^2)$	30 $(1,4)$	20 $(2,3)$	24 (5)
$[5]$	1	1	1	1	1	1	1
$[4,1]$	4	2	1	0	0	-1	-1
$[3,2]$	5	1	-1	1	-1	1	0
$[3,1^2]$	6	0	0	-2	0	0	1
$[2^2,1]$	5	-1	-1	1	1	-1	0
$[2,1^3]$	4	-2	1	0	0	1	-1
$[1^5]$	1	-1	1	1	-1	-1	1

$n=6$

类 / 分割	1 (1^6)	15 $(1^4,2)$	40 $(1^3,3)$	45 $(1^2,2^2)$	90 $(1^2,4)$	120 $(1,2,3)$	144 $(1,5)$	15 (2^3)	90 $(2,4)$	40 (3^2)	120 (6)
$[6]$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$[5,1]$	5	3	2	1	1	0	0	-1	-1	-1	-1
$[4,2]$	9	3	0	1	-1	0	-1	3	1	0	0
$[4,1^2]$	10	2	1	-2	0	-1	0	-2	0	1	1
$[3^2]$	5	1	-1	1	-1	1	0	-3	-1	2	0
$[3,2,1]$	16	0	-2	0	0	0	1	0	0	-2	0
$[2^3]$	5	-1	-1	1	1	-1	0	3	-1	2	0
$[3,1^3]$	10	-2	1	-2	0	1	0	2	0	1	-1
$[2^2,1^2]$	9	-3	0	1	1	0	-1	-3	1	0	0
$[2,1^4]$	5	-3	2	1	-1	0	0	1	-1	-1	1
$[1^6]$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

7.5.3　共轭表示及其特征标之间的关系

如果把分割$[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$所对应的 Young 图进行行和列的置换，得到一个新的 Young 图，记这个新的 Young 图的分割为$[\tilde{\lambda}]$，则称$[\tilde{\lambda}]$的 Young 图为$[\lambda]$的共轭(或对偶)Young 图．从而称不可约表示$[\lambda]$与不可约表示$[\tilde{\lambda}]$互为共轭表示.

如 S_4 群$[4]$，$[1^4]$互为共轭表示，$[3,1]$与$[2,1^2]$互为共轭表示，$[2^2]$与它自身共轭，因而也称$[2^2]$是自共轭表示.

互为共轭的不可约表示有相同的维数．它们的特征标之间存在关系：

$$\chi^{[\lambda]}_{(\nu)}=\chi^{[1^n]}_{(\nu)}\chi^{[\tilde{\lambda}]}_{(\nu)} \tag{7.5.9}$$

由 Frobenius 定理容易证明这一结果.

7.6 置换群的标准不可约表示

7.6.1 置换群 S_n 的不可约表示对子群 S_{n-1} 的分解规则

置换群 S_n 的一个不可约表示$[\lambda]$，对于子群 S_{n-1}一般是可约的，也就是说它的特征标$\chi^{[\lambda]}$可分解为子群 S_{n-1}的不可约表示特征标的直和. 比如，S_n 群的一个类$(\nu, 1)$(其中长为 1 的循环标记有一个数字不发生置换)，对应于子群的类(ν)，因而群 S_n 的特征标可分解为子群 S_{n-1}特征标的直和，即

$$\chi^{[\lambda]}_{(\nu,1)} = \sum_{[\lambda']} a_{[\lambda],[\lambda']}\chi^{[\lambda']}_{(\nu)} \tag{7.6.1}$$

$[\lambda'] = [\lambda_1', \lambda_1', \cdots, \lambda_{n-1}']$为代表 S_{n-1}群不可约表示的分割，$\lambda_1' + \lambda_2' +, \cdots, +\lambda_{n-1}' = n-1$，$\lambda_1' \geqslant \lambda_2' \geqslant, \cdots, \geqslant \lambda_{n-1}' \geqslant 0$. $a_{[\lambda],[\lambda']}$为子群不可约表示$[\lambda']$在大群不可约表示$[\lambda]$对子群 S_{n-1}的分导表示中出现的重复度. 由 Frobenius 定理可证明 S_n 群到 S_{n-1}群不可约表示分解规则(即(7.6.1)式)为

$$\begin{array}{ccc} S_n & \longrightarrow & S_{n-1} \\ [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n] & \longrightarrow & \displaystyle\sum_{\substack{i \\ (\lambda_i - 1 \geqslant \lambda_{i+1})}} \oplus [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{i-1}, \lambda_{i+1}, \cdots, \lambda_n] \end{array} \tag{7.6.2}$$

上式求和中 $\lambda_i - 1 \geqslant \lambda_{i+1}$的限制是保证$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{i-1}, \lambda_{i+1}, \cdots, \lambda_n]$符合分割的条件，即

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + (\lambda_i - 1) + \lambda_{i+1} + \cdots + \lambda_n = n-1$$

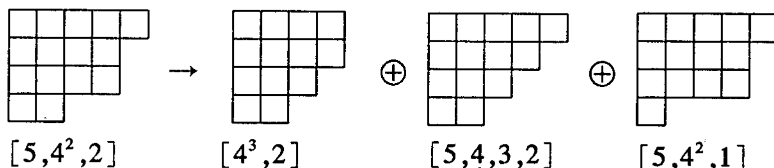
$$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_i - 1 \geqslant \lambda_{i+1} \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \geqslant 0$$

分解规则(7.6.2)也由 Young 图表示，即 S_n 群分割$[\lambda]$的 Young 图分解为 S_{n-1}群的若干 Young 图之和，这些 Young 图由 S_n 群 Young 图$[\lambda]$逐次在每一行去掉最后一个方块后仍然为 Young 图那些子 Young 图构成.

比如 S_{15}群的不可约表示$[5, 4^2, 2]$分解为 S_{14}群的不可约表示$[\lambda']$为

$$[54^2 2] \longrightarrow [4^3 2] \oplus [5432] \oplus [54^2 1]$$

用 Young 图表示则为



Young 图$[4^3, 2]$是由 Young 图$[5, 4^2, 2]$第一行去掉一个方块构成；Young 图$[5, 4, 3, 2]$是由 Young 图$[5, 4^2, 2]$第三行去掉一个方块构成；Young 图$[5, 4^2, 1]$是由 Young 图$[5, 4^2, 2]$第四行去掉一个方块构成. 但是在 Young 图$[5, 4^2, 1]$的第二行去掉一个方块，就不构成 Young 图. 因而在$[5, 4^2, 2]$子群分解中只出现三种子群的不可约表示.

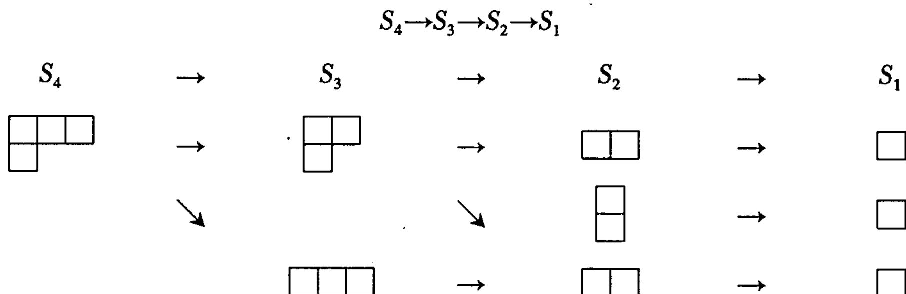
对 S_{n-1}群的不可约表示，按(7.6.2)式同样可分解为子群 S_{n-2}的不可约表示的直和，

这样可最后完成整个群链

$$S_n \supset S_{n-1} \supset S_{n-2} \supset, \cdots, \supset S_2 \supset S_1$$

的不可约表示分解. 如

$$S_4 \to S_3 \to S_2 \to S_1$$



即

$$S_4 \ \to \ S_3 \ \to \ S_2 \to \ S_1$$

$$[31] \to \begin{cases} [21] \to \begin{cases} [2] \to [1] \\ \oplus \\ [11] \to [1] \end{cases} \\ \oplus \\ [3] \to [2] \to [\ ]1 \end{cases}$$

7.6.2　置换群不可约表示的标准基矢——Yamanouchi 符号

S_n 群的不可约表示$[\lambda]$的表示空间是 $d([\lambda])$维的，在其中任意选择一组基矢就得到了 $n!$个表示矩阵$\{\hat{D}^{[\lambda]}(P), P \in S_n\}$. 当选择 $P \in S_{n-1}$时，表示矩阵 $\hat{D}^{[\lambda]}(P), P \in S_{n-1}$为子群 S_{n-1}的可约表示(分导表示)，它可表示为 S_{n-1}群不可约表示的直和. 但是一般 $\hat{D}^{[\lambda]}(P)$对于子群 S_{n-1}并不是准对角化的，需要把 S_n 群不可约表示的 $d([\lambda])$个基矢通过一个线性变换，得到一组新的基矢，才能使新的基矢下的表示矩阵 $\hat{D}'^{[\lambda]}(P)$，对子群 S_{n-1}是准对角化的. 当然，通过对基矢的线性变换也可得到一组基矢，这组基矢所给出的 S_n 群的不可约表示矩阵不仅对子群 S_{n-1}的元素是准对角化的，而且对 S_{n-2}群也是准对角化的.

如果对 S_n 的不可约表示$[\lambda]$的基矢进行适当线性组合，得到一组基矢，由这组基矢得到的 S_n 群的表示矩阵 $\hat{D}^{[\lambda]}$对整个群链

$$S_n \supset S_{n-1} \supset S_{n-2} \supset, \cdots, \supset S_2 \supset S_1$$

的子群都是准对角化的，则称这样的基矢为标准基矢.

不可约表示$[\lambda]$的维数等于由$[\lambda]$得到的 Young 图给出的标准 Young 盘的数目. 因而可用标准 Young 盘来标记不可约表示的基矢，而标准基矢通常使用 Yamanouchi 符号(简称 Y-符号)$(r_n r_{n-1} \cdots 1)$来标记，下面讨论 Y-符号.

为了说明 Y-符号的意义，以 S_6 群不可约表示$[321]$按子群链分解为例，说明所涉及

的 Y-符号.

S_6 群不可约表示[321]对子群 S_5 的分解为

S_6 S_5

$\hat{D}^{[321]}$ → $\hat{D}_1$ ⊕ $\hat{D}_2$ ⊕ $\hat{D}_3$

$d([321])=16$ $d([221])=5$ $d([31^2])=6$ $d([32])=5$

这表明 S_6 的不可约表示分解为子群 S_5 的三个不可约表示的直和，当采用标准基矢时，矩阵 $\hat{D}^{[321]}$对子群 S_5 的元素为

$$(\hat{D}^{[321]}(P))=\begin{pmatrix}\hat{D}_1(P) & & \\ & \hat{D}_2(P) & \\ & & \hat{D}_3(P)\end{pmatrix},\quad P\in S_5$$

$\hat{D}_1$，$\hat{D}_2$，$\hat{D}_3$ 分别为 S_5 群不可约表示[221]，$[31^2]$和[32]的表示矩阵. $\hat{D}_i$ 中符号 i 表示对 S_6 群 Young 图[321]的第 i 行去掉最后一个方块所得到的 S_5 群相应 Young 图的不可约表示，因而符号 i 是有明确意义的.

然后再把 S_5 群的三个不可约表示向子群 S_4 分解，它们为

S_5 S_4

$\hat{D}_1$ → $\hat{D}_{12}$ ⊕ $\hat{D}_{13}$

$d([221])=5$ $d([21^2])=3$ $d([2^2])=2$

S_5 S_4

$\hat{D}_2$ → $\hat{D}_{21}$ ⊕ $\hat{D}_{23}$

$d([31^2])=6$ $d([21^2])=3$ $d([31])=3$

S_5 S_4

$\hat{D}_3$ → $\hat{D}_{31}$ ⊕ $\hat{D}_{32}$

$d([3,2])=5$ $d([2^2])=2$ $d([31])=3$

对于标准基矢，当取 S_4 群的元素 P 时，它的表示矩阵为

$$\hat{D}_1 = \begin{pmatrix} D_{12} & \\ & D_{13} \end{pmatrix}, \quad \hat{D}_2 = \begin{pmatrix} D_{21} & \\ & D_{23} \end{pmatrix}, \quad \hat{D}_3 = \begin{pmatrix} D_{31} & \\ & D_{32} \end{pmatrix}$$

而 $\hat{D}_{ij}$ 的符号表示它是由 S_6 群的 Young 图去掉第 i 行右端的一个方块，然后又去掉 S_5 群 Young 图第 j 行右端的一个方块.

继续把 S_4 群的 $\hat{D}_{ij}$ 向 S_3 群和 S_2 群以及 S_1 群分解得到

S_4 → S_3

$\hat{D}_{31}$ → $\hat{D}_{312}$

$d([2^2])=2$　　$d([21])=2$

S_4 → S_3

$\hat{D}_{32}$ → $\hat{D}_{321}$ ⊕ $\hat{D}_{322}$

$d([31])=3$　　$d([21])=2$　　$d([3])=1$

此时标准基下的表示矩阵为

$$\hat{D}_{31} = \hat{D}_{312}, \quad \hat{D}_{32} = \begin{pmatrix} D_{321} & \\ & D_{322} \end{pmatrix}$$

然后再把 S_3 群向子群 S_2 群分解，即

S_3 → S_2

$\hat{D}_{321}$ → $\hat{D}_{3211}$ ⊕ $\hat{D}_{3212}$

$d([21])=2$　　$d([1^2])=1$　　$d([2])=1$

S_3 → S_2

$\hat{D}_{332}$ → $\hat{D}_{3221}$

$d([3])=1$　　$d([2])=1$

最后把 S_2 群向 S_1 群分解,得到

S_2 → S_1　　S_2 → S_1

$\hat{D}_{3212}$ → $\hat{D}_{32121}$　　$\hat{D}_{3211}$ → $\hat{D}_{32112}$

通过这种约化把 S_6 群不可约表示[321]的表示矩阵约化为整个群链的准对角化的表

示矩阵. 而每一个分解链都用6个数字表示，即$(r_6, r_5, r_4, r_3, r_2, 1)$，其中$r_6$表示对$S_6$的Young图[321]去掉第$r_6$行的方块而得到$S_5$的Young图;$r_5$表示把$S_5$的Young图去掉第$r_5$行的方块而得到$S_4$的Young图;$r_4$表示去掉$S_4$的Young图的第$r_4$行的方块而得到$S_3$的Young图;$r_3$表示去掉$S_3$的Young图上第$r_3$行的方块而得到$S_2$的Young图;$r_2$表示去掉$S_2$的Young图上第$r_2$行的方块而得到$S_1$的Young图. 因为$S_1$群所有的不可约表示都只有一个方块，所以最后都标记上1.

对于一般的S_n群，由群链

$$S_n \supset S_{n-1} \supset, \cdots, \supset S_2 \supset S_1$$

进行同样约化，也可用n个数$(r_n, r_{n-1}, \cdots, r_2, 1)$表示这种分解，称这组数为Y-符号. Y-符号的个数与S_n群不可约表示$[\lambda]$的维数是相同的，因而可用这种Y-符号标记不可约表示的标准基.

S_n群$d([\lambda])$维的不可约表示$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m, 0, \cdots, 0]$的标准基矢可用Y-符号标记为

$$\Phi_{(r_n, r_{n-1}, \cdots, r_2, 1)}$$

各种可能的Y-符号$(r_n, r_{n-1}, \cdots, r_2, 1)$共$d([\lambda])$个，它们完全标记了$d([\lambda])$个基矢. 如果$[\lambda]$中只有$m$个非零的$\lambda_i (i=1, 2, \cdots, m)$，Y-符号中的$r_i \leqslant m$, $i=1, 2, 3, \cdots, m$.

S_n群不可约表示$[\lambda]$的$d([\lambda])$个基矢，可通过对它们的线性组合得到的$d([\lambda])$个标准基矢$\{\Phi_{(r_n, r_{n-1}, \cdots, 1)}\}$的Y-符号$(r_n, r_{n-1}, \cdots, 1)$与标准Young盘存在一一对应关系，也就是用Y-符号表示的标准不可约基矢也可等价地用标准Young盘表示. 下面把前面讨论的S_6群不可约表示[321]的标准基矢与标准Young盘间的对应关系作为例子给出如下：

$$\begin{array}{ccccc}
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&6\\\hline 3&5\\\cline{1-2} 4\\\cline{1-1}\end{array} &
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&6\\\hline 2&5\\\cline{1-2} 4\\\cline{1-1}\end{array} &
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&4&6\\\hline 2&5\\\cline{1-2} 3\\\cline{1-1}\end{array} &
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&6\\\hline 3&4\\\cline{1-2} 5\\\cline{1-1}\end{array} &
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&6\\\hline 2&4\\\cline{1-2} 5\\\cline{1-1}\end{array} \\
\Phi_{(123211)} & \Phi_{(123121)} & \Phi_{(121321)} & \Phi_{(132211)} & \Phi_{(132121)}
\end{array}$$

这五个基矢的共同特点是$r_6=1$，当符号6不参加置换时，它们构成子群S_5的不可约表示$[2^2 1]$的基矢.

它们又可分为两组，即$\{\Phi_{(123211)}, \Phi_{(123121)}, \Phi_{(121321)}\}$和$\{\Phi_{(132211)}, \Phi_{(132121)}\}$，当符号6和5都不参加置换时它们分别构成子群$S_4$的不可约表示$[21^2]$和$[2^2]$的基矢. 而当4，5，6三个符号都不参加置换时，这些基矢又分别构成S_3群不可约表示的基，即$[1^3]$的基为$\Phi_{(121321)}$，[21]的基$\{\Phi_{(123211)}, \Phi_{(123211)}\}$，另外一组为$S_3$群另一个不可约表示[21]的基$\{\Phi_{(132211)}, \Phi_{(132121)}\}$(因为$S_5$不可约表示$[2^2 1]$分解为$S_3$群不可约表示[21]时[21]出现两次).

另一组标基矢为

$$\begin{array}{cccccc}
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&5\\\hline 3&6\\\cline{1-2} 4\\\cline{1-1}\end{array} &
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&5\\\hline 2&6\\\cline{1-2} 4\\\cline{1-1}\end{array} &
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&4&5\\\hline 2&6\\\cline{1-2} 3\\\cline{1-1}\end{array} &
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2&6\\\cline{1-2} 5\\\cline{1-1}\end{array} &
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3&6\\\cline{1-2} 5\\\cline{1-1}\end{array} &
\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&6\\\cline{1-2} 5\\\cline{1-1}\end{array} \\
\Phi_{(213211)} & \Phi_{(213121)} & \Phi_{211321)} & \Phi_{(231121)} & \Phi_{(231211)} & \Phi_{(232111)}
\end{array}$$

这六个基矢是 S_5 群不可约表示$[31^2]$的基矢，而$\{\Phi_{(213211)}, \Phi_{(213121)}, \Phi_{(211321)}\}$为 S_4 群不可约表示$\{21^2\}$的基矢，$\{\Phi_{(231121)}, \Phi_{(231211)}, \Phi_{(211321)}\}$为 S_4 群不可约表示$[31]$的基矢. 这些基矢还可分解为 S_1，S_2 的不可约基矢，这里就不做讨论了.

第三组标准基矢为

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&5\\\cline{1-2} 6\\\cline{1-1}\end{array}\quad \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3&5\\\cline{1-2} 6\\\cline{1-1}\end{array}\quad \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2&5\\\cline{1-2} 6\\\cline{1-1}\end{array}\quad \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&5\\\hline 3&4\\\cline{1-2} 6\\\cline{1-1}\end{array}\quad \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&5\\\hline 2&4\\\cline{1-2} 6\\\cline{1-1}\end{array}$$

$$\Phi_{(322111)}\qquad \Phi_{(321211)}\qquad \Phi_{(231121)}\qquad \Phi_{(312211)}\qquad \Phi_{(312121)}$$

它们是 S_5 群不可约表示$[32]$的基矢，也可继续对 S_4，S_3 和 S_2，S_1 进行分解.

上述例子说明 S_n 群的 Y-符号$\{r_n, r_{n-1}, r_{n-2}, \cdots, r_2, 1\}$与标准 Young 盘之间存在一一对应的关系，即全部 r_n 相同的 Y-符号对应于在 r_n 行最后一个方块上放置数字 n 的所有标准 Young 盘. 令 $r_n = k$，则这些 Y-符号的基矢同时也是 S_{n-1} 群不可约表示$[\lambda_1\lambda_2\cdots(\lambda_k-1)\lambda_{k+1}\cdots]$的基矢. 全部 r_n 相同 r_{n-1} 相同的 Y-符号，对应于全部 r_n 行最后一个方块放置 n，r_{n-1} 行最后一个方块放置 $n-1$ 的全部标准 Young 盘. 如果 $r_n = k$，$r_{n-1} = l$，它们同时也是 S_{n-2} 群不可约表示$[\lambda_1\lambda_2\cdots(\lambda_k-1)\cdots(\lambda_l-1)\cdots]$的表示基矢. 总之，Y-符号$\{r_n r_{n-1}\cdots r_2 1\}$对应于 r_n 行最后一个方块上放 n，r_{n-1} 行最后一个方块放 $n-1$，$\cdots r_2$ 行最后一个方块放 2，第一行第一个方块上放 1，对于 $r_n r_{n-1}\cdots r_2$ 中相同的数字，如 $r_{n-1} = r_k = r_l = \cdots$. 当在 r_{n-1} 行最后的方块上放置 $n-1$ 之后，再在它前面方块上放 k，然后再放置 l. 最后由 n 个数$\{r_n r_{n-1}\cdots r_2 1\}$放满了 Young 图中的方块而构成一个标准 Young 盘. 因而 Y-符号也可按标准 Young 盘进行字典顺序编号.

由标准基矢构成的不可约表示称为标准表示.

一般 S_n 群不可约表示$[\lambda]$的标准基矢用 Y-符号(r)表示为

$$\Phi_{(r)}^{[\lambda]}(1, 2, \cdots, n) = |[\lambda](r_n, r_{n-1}, \cdots, r_2, 1)\rangle$$

这 $d([\lambda])$个基矢不仅是 S_n 群不可约表示$[\lambda]$的基矢，而且还是子群 $S_{n-1}\supset S_{n-2}\supset, \cdots, \supset S_2\supset S_1$ 的不可约表示的基矢. 比如对于 S_{n-i} 群，基矢集合

$$\{[\lambda](r_n, r_{n-1}, \cdots, r_{n-i+1}, r_{n-i}, \cdots, r_2, 1)\rangle$$
$$r_{n-i}, r_{n-i-1}, r_2 \text{ 取所有可能的值}\}$$

为 S_{n-i} 群的不可约表示$[\lambda']$的基矢，$[\lambda']$由 Y-符号中 $r_n, r_{n-1}, \cdots, r_{n-i+1}$ 决定. 对 n 在 r_n 行，$n-1$ 在 r_{n-1} 行，$\cdots$，$n-i+1$ 在 r_{n-i+1} 行的标准 Young 盘，逐步去掉这些方块后所得到的 S_{n-i} 群的 Young 图，即为$[\lambda']$. 对于 S_n 群，$n, n-1, \cdots, n-i+1$ 分别处于 r_n 行，r_{n-i} 行，$\cdots$，r_{n-i+1} 行标准 Young 盘，当逐次去掉它们后，余下了$[\lambda']$所标记的 Young 盘，它有 $n-i$ 个方块，这种标准 Young 盘数正是不可约表示$[\lambda']$的维数.

7.7 标准不可约表示的表示矩阵

在本章第一节中，我们已说明 S_n 群的任何一个置换都可表示为循环的乘积，而任何一个循环$(i, j, k, \cdots, l)$都可表示为对换的乘积，即

$$(i, j, k, \cdots, p, l) = (i, l)(i, p)\cdots(i, k)(i, j)$$

而任何对换(i, j)都可表示为

$$(i, j) = (1, i)(1, j)(1, i)$$

因而由$(n-1)$个对换$(1, 2)$, $(1, 3)$, $\cdots$, $(1, n)$可构成任何一个置换. 这$(n-1)$个对换称为置换群S_n的生成元. 对于S_n的表示矩阵只须给出这$(n-1)$个元素的表示矩阵就可以了, 由它们可生成全部表示矩阵.

S_n群不可约表示$[\lambda]$的标准基矢, 它同时也是S_{n-1}, S_{n-2}, $\cdots$, S_2, S_1群的不可约表示基矢. 因而如果知道了S_{n-1}群的不可约表示, 就可寻求到S_n的不可约表示, 下边就来讨论这个问题.

7.7.1 由 S_{n-1} 群表示矩阵寻求 S_n 群表示矩阵的 Young-Yamanouchi 定理

如果S_n群不可约表示$[\lambda]$的标准基矢用Y-符号$(r) = (r_n, r_{n-1}, \cdots, r_2, 1)$表示为$\{|[\lambda](r)\rangle\}$, 则$S_n$群元素$S$的表示矩阵为

$$D^{[\lambda]}(s)_{(r)(r')} = \langle[\lambda](r) | \hat{P}(s) | [\lambda](r')\rangle$$

$$\hat{P}(s) | [\lambda](r')\rangle = \sum_{(r)} D^{[\lambda]}(s)_{(r)(r')} | [\lambda](r)\rangle \tag{7.7.1}$$

若S_{n-1}群的不可约表示矩阵是已知的, 则对S_n群只须计算生成元$(1, n)$的表示矩阵, (因为S_n群的其它生成元$(1, 2)$, $(1, 3)$, $\cdots$, $(1, n-1)$已包括在子群S_{n-1}中了). 而

$$(1, n) = (n-1, n)(1, n-1)(n-1, n)$$

因而由S_{n-1}群标准不可约表示矩阵寻求S_n群的标准不可约表示矩阵归结为计算$(n-1, n)$的表示矩阵, 这种矩阵可由下述公式表达:

$$\left\{\begin{aligned}
&\hat{P}(n-1, n) | [\lambda](r, r, r_{n-2}, \cdots, r_2, 1)\rangle \\
&= | [\lambda](r, r, r_{n-2}, \cdots, r_2, 1)\rangle && \text{(a)} \\
&\hat{P}(n-1, n) | [\lambda](r, r-1, r_{n-2}, \cdots, r_2, 1)\rangle \\
&= -| [\lambda](r, r-1, r_{n-2}, \cdots, r_2, 1)\rangle && \text{(b)} \\
&\hat{P}(n-1, n) | [\lambda](r, s, r_{n-2}, \cdots, r_2, 1)\rangle \\
&= \sigma_{rs} | [\lambda](r, s, r_{n-2}, \cdots, r_2, 1)\rangle + \sqrt{1-\sigma_{rs}^2} | [\lambda](s, r, r_{n-2}, \cdots, r_2, 1)\rangle && \text{(c)}
\end{aligned}\right. \tag{7.7.2}$$

当Y-符号$(r-1, r, r_{n-2}, \cdots, r, 1)$不存在时, 使用(b)式;当Y-符号$(r, s, r_{n-2}, \cdots, r_2, 1)$和$(s, r, r_{n-2}, \cdots, r_2, 1)$都存在时, 使用(c)式, 其中

$$\sigma_{rs} = \frac{1}{\lambda_r - \lambda_s + s - r} = -\sigma_{sr} \tag{7.7.3}$$

利用(7.7.2)式, 即可由S_{n-1}群标准不可约表示求出了S_n群的标准不可约表示. 这里对(7.7.2)式不予证明, 有兴趣的读者可参阅 Hamermesh 的著作.

由(7.7.2)式可看到矩阵元

$$\langle[\lambda](r) | \hat{P}(n-1, n) | [\lambda](r')\rangle$$

是实数$(\sigma_{rs} < 1)$, 而S_1, S_2群的不可约表示都是实的, 因而置换群S_n的标准表示矩阵都

是实的．下面由(7.7.2)式证明置换群的标准表示矩阵是实的酉矩阵，即标准表示都是实的酉表示．

以Y-符号表示的标准不可约表示矩阵 $D^{[\lambda]}(n-1,n)$ 与它的厄米共轭矩阵之积的矩阵元为

$$[D^{[\lambda]}(n-1,n)\cdot D^{[\lambda]}(n-1,n)^{+}]_{(r)(r')}$$
$$=\sum_{(r'')}\langle[\lambda](r)\mid\hat{P}(n-1,n)\mid[\lambda](r'')\rangle\langle[\lambda](r')\mid\hat{P}(n-1,n)\mid[\lambda](r'')\rangle^{*}$$

代入(7.7.2)式，稍加整理可得到

$$[D^{[\lambda]}(n-1,n)\cdot D^{[\lambda]}(n-1,n)^{+}]_{(r)(r')}$$
$$=\begin{cases}\delta_{(r)(r')}\\(\sigma_{rs}^{2}+1-\sigma_{rs}^{2})\delta_{(r)(r')}=\delta_{(r)(r')}\end{cases}\tag{7.7.4}$$

这表明 $D^{[\lambda]}(n-1,n)$ 是酉矩阵，由此可以得到置换群全部标准不可约表示都是实酉表示．

置换群的不可约表示 $[\lambda]$ 都存在一个共轭表示 $[\tilde{\lambda}]$，(包括自共轭表示)，不可约表示 $[\lambda]$ 的标准基矢用Y-符号 $(r)=(r_n,r_{n-1},\cdots,r_2,1)$ 表示，则对共轭表示 $[\tilde{\lambda}]$ 的标准基矢用Y-符号 $[\tilde{r}]$ 表示．Y-符号 (r) 来源于 $[\lambda]$ 的标准Young盘，而 $[\tilde{r}]$ 来自共轭Young盘．比如 S_4 群的不可约表示[31]，它的标准Young盘为

T_1	T_2	T_3
1 2 3 4	1 2 4 3	1 3 4 2
$(r)=(2111)$	$(r)=(1211)$	$(r)=(1121)$

它的共轭Young盘为

$\tilde{T}_1$	$\tilde{T}_2$	$\tilde{T}_3$
1 4 2 3	1 3 2 4	1 2 3 4
$(\tilde{r})=(1321)=(\widetilde{2111})$	$(\tilde{r})=(3121)=(\widetilde{1211})$	$(\tilde{r})=(3211)=(\widetilde{1121})$

而不可约表示 $[\lambda]$ 的标准表示矩阵与共轭表示 $[\tilde{\lambda}]$ 的标准表示矩阵之间存在如下简单关系：

$$\langle[\tilde{\lambda}](\tilde{r})\mid\hat{P}(n-1,n)\mid[\tilde{\lambda}](\tilde{r}')\rangle$$
$$=\begin{cases}\langle[\lambda](r)\mid\hat{P}(n-1,n)\mid[\lambda](r')\rangle, & \text{当}(r)\neq(r')\text{时}\\-\langle[\lambda](r)\mid\hat{P}(n-1,n)\mid[\lambda](r')\rangle, & \text{当}(r)=(r')\text{时}\end{cases}\tag{7.7.5}$$

这是Young-Yamanouchi定理的一重要推论．

对 S_n 群，不可约表示$[n]$和$[1^n]$分别为一维的对称表示和反对称表示，它们的表示矩阵是 1 或 -1，是完全已知的. 而不可约表示$[\lambda]$的表示矩阵由(7.7.2)式求出来，由(7.7.5)式就可求出共轭表示的表示矩阵. 因而，(7.7.5)式使寻求 S_n 群不可约表示矩阵的工作大大简化了.

7.7.2 S_2，S_3，S_4 群的标准不可约表示矩阵

作为使用(7.7.2)式寻求 S_n 群标准不可约表示矩阵的实际应用，下面讨论 S_2，S_3 和 S_4 群的标准不可约表示矩阵.

1. S_2 群的不可约表示矩阵

S_2 群的不可约表示$[2]$和$[1^2]$都是 1 维表示，它们的标准 Young 盘和 Y-符号分别为

$$\boxed{1}\boxed{2} \qquad (\gamma)=(11) \qquad\qquad \begin{array}{c}\boxed{1}\\\boxed{2}\end{array} \qquad (\gamma)=(21)$$

标准基矢为$|[2](11)\rangle$，$|[1^2](21)\rangle$. 对这两个基矢由(7.7.2)式的(a)和(b)得到

$$\begin{aligned}\hat{P}(1,2)\,|\,[2](11)\rangle &= |\,[2](11)\rangle\\ \hat{P}(1,2)\,|\,[1^2](21)\rangle &= -|\,[1^2](21)\rangle\end{aligned} \tag{7.7.6}$$

这说明它们构成 S_2 2 维不可约表示的基，表示矩阵为

$$D(e)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad D(1,2)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

2. S_3 群的不可约表示矩阵

S_3 群存在 3 个不可约表示$[3]$，$[21]$和$[1^3]$，它们的标准基矢为

$$|[3](111)\rangle,\quad |[21](211)\rangle,\quad |[21](121)\rangle,\quad |[1^3](321)\rangle$$

也可用简单符号 $\Phi_i^{[\lambda]}$ 标记标准基，i 为 Y-符号的字典编序($D.O$). 其中$|[3](111)\rangle$和$|[1^3](321)\rangle$分别为 S_2 群不可约表示$[2]$和$[1^2]$的标准基矢. 因而对于 S_3 群的生成元(1，2)为

$$\begin{aligned}\hat{P}(1,2)\,|\,[3](111)\rangle &= |\,[3](111)\rangle\\ \hat{P}(1,2)\,|\,[1^3](321)\rangle &= -|\,[1^3](321)\rangle\end{aligned}$$

由(7.7.2)式的(a)和(b)得到

$$\begin{aligned}\hat{P}(2,3)\,|\,[3](111)\rangle &= |\,[3](111)\rangle\\ \hat{P}(2,3)\,|\,[1^3](321)\rangle &= -|\,[1^3](321)\rangle\end{aligned}$$

由于

$$(1,3)=(2,3)(1,2)(2,3)$$

因而寻求对换(2，3)的表示矩阵就可得到生成元(1，3)的表示矩阵了. 由上面的讨论可看到生成元(1，3)为

$$\begin{aligned}\hat{P}(1,3)\,|\,[3](111)\rangle &= |\,[3](111)\rangle\\ \hat{P}(1,3)\,|\,[1^3](321)\rangle &= -|\,[1^3](321)\rangle\end{aligned}$$

这就证明了不可约表示[3]是全对称表示，$[1^3]$是反对称表示.

对于 n 为任意数的 S_n 群，不可约表示$[n]$和$[1^n]$的标准基矢为$|[n](1,1,1,\cdots,1)\rangle$和$|[n](n,n-1,\cdots,1)\rangle$(Y-符号$(n-1,n,\cdots,1)$不存在). 因而由(7.7.2)式的(a)和(b)可得到

$$\hat{P}(n-1,n)|[n](1,1,\cdots,1)\rangle=|[n](1,1,\cdots,1)\rangle$$

$$\hat{P}(n-1,n)|[1^n](n,n-1,\cdots,1)\rangle=-|[1^n](n,n-1,\cdots,1)\rangle$$

这就得到全对称表示$[n]$和反对称表示$[1^n]$表示的1维的矩阵，以后对这两个不可约表示就不再讨论了.

而不可约表示[21]的两个标准基矢$|[21](211)\rangle$和$|[21](121)\rangle$分别为 S_2 群不可约表示[2]和$[1^2]$的标准基，因而它们对生成元(1, 2)的表示矩阵为

$$D^{[21]}(12)=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$$

下面只需讨论(2, 3)的表示矩阵. 由(7.7.2)式的(c)可得到(由于(121)是[21]不可约表示的Y-符号，不适用(7.7.2)式的(b))：

$$\begin{aligned}\hat{P}(2,3)|[21](211)\rangle&=\sigma_{21}|[21](211)+\sqrt{1-\sigma_{21}^2}|[21](121)\rangle\\&=-\frac{1}{2}|[21](211)\rangle+\frac{\sqrt{3}}{2}|[21](121)\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{P}(2,3)|[21](121)\rangle&=\sigma_{12}|[21](121)+\sqrt{1-\sigma_{12}^2}|[21](211)\rangle\\&=\frac{1}{2}|[21](121)\rangle+\frac{\sqrt{3}}{2}|[21](1211)\rangle\end{aligned}$$

这表示对换(2, 3)的标准表示矩阵为

$$D^{[21]}(23)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

于是

$$D^{[21]}(13)=D^{[21]}(23)\cdot D^{[21]}(12)\cdot D^{[21]}(23)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

至此全部得到了 S_3 群生成元.

3. *S_4 群的标准不可约表示矩阵*

S_4 群有5个不可约表示，即[4]，$[1^4]$，[31]，$[21^2]$和$[2^2]$，其中全对称和全反对称表示[4]和$[1^4]$不须讨论，$[21^2]$是[31]的共轭表示，实际上只须寻求$[21^2]$和$[2^2]$的标准表示矩阵.

1° S_4 群不可约表示$[21^2]$的标准表示矩阵

$[21^2]$是 3 维表示，它的标准基矢为

$$|[21^2](1321)\rangle,\quad |[21^2](3121)\rangle,\quad |[21^2](3211)\rangle$$

$|[21^2](1321)\rangle$是 S_3 群不可约表示$[1^3]$的标准基，$|[21^2](3121)\rangle$和$|[21^2](3211)\rangle$是 S_3 群不可约表示$[21]$的标准基，因而对生成元$(1,2)$和$(1,3)$的表示矩阵为

$$D^{[21^2]}(12)=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$D^{[21^2]}(13)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

由(7.7.2)式的(c)和(b)得到

$$\begin{aligned}\hat{P}(34)\,|[21^2](1321)\rangle &=\sigma_{13}\,|[21^2](1321)\rangle+\sqrt{1-\sigma_{13}^2}\,|[21^2](3121)\rangle\\ &=\frac{1}{3}\,|[21^2](1321)\rangle+\frac{2}{3}\sqrt{2}\,|[21^2](3121)\rangle\end{aligned}$$

$$\hat{P}(34)\,|[21^2](3121)\rangle=-\frac{1}{3}\,|[21^2](3121)\rangle+\frac{2}{3}\sqrt{2}\,|[21^2](1321)\rangle$$

$$\hat{P}(34)\,|[21^2](3211)\rangle=-|[21^2](3211)\rangle$$

由此得到表示矩阵

$$D^{[21^2]}(34)=\begin{pmatrix}\frac{1}{3} & \frac{2}{3}\sqrt{2} & 0\\ \frac{2}{3}\sqrt{2} & -\frac{1}{3} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

而表示矩阵 $D^{[21^2]}(1,4)$为

$$\begin{aligned}D^{[21^2]}(14)&=D^{[21^2]}(34)\cdot D^{[21^2]}(13)\cdot D^{[21^2]}(34)\\ &=\begin{pmatrix}-\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{2}}{3} & \sqrt{\frac{2}{3}}\\ \frac{\sqrt{2}}{3} & \frac{5}{6} & -\frac{1}{2\sqrt{3}}\\ \sqrt{\frac{2}{3}} & -\frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\end{aligned}$$

对于$[21^2]$的共轭表示$[31]$，(7.7.5)式可得到它的表示矩阵

$$D^{[31]}(12)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\quad D^{[31]}(13)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\0&-\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$D^{[31]}(14)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{3}&-\frac{\sqrt{2}}{3}&-\sqrt{\frac{2}{3}}\\-\frac{\sqrt{2}}{3}&\frac{5}{6}&-\frac{1}{2\sqrt{3}}\\-\frac{\sqrt{6}}{3}&-\frac{1}{2\sqrt{3}}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

不可约表示[31]的基矢为

$$|[2\tilde{1}](13\tilde{2}1)=|[31](2111)\rangle$$
$$|[2\tilde{1}](3\tilde{1}21)=|[31](1211)\rangle$$
$$|[2\tilde{1}](32\tilde{1}1)=|[31](1121)\rangle$$

2° S_4 群不可约表示$[2^2]$的标准表示矩阵

$[2^2]$是2维表示，它的标准基矢为

$$|[2^2](2211)\rangle,\ |[2^2](2121)\rangle$$

它们也是 S_3 群不可约表示[21]的标准基矢. 因而对生成元(1, 2)和(1, 3)的表示矩阵为

$$D^{[2^2]}(12)=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\quad D^{[2^2]}(13)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

由(7. 7. 2)式的(a)和(b)可得到

$$\hat{P}(34)\,|[2^2](2211)\rangle=|[2^2](2211)\rangle$$
$$\hat{P}(34)\,|[2^2](2121)\rangle=-|[2^2](2121)\rangle$$

于是表示矩阵 $D^{[2^2]}(34)$为

$$D^{[2^2]}(34)=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

而

$$D^{[2^2]}(14)=D^{[2^2]}(34)\cdot D^{[2^2]}(13)\cdot D^{[2^2]}(34)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

作为寻求标准不可约表示矩阵的例子，讨论了上述一些简单置换群的标准不可约表示矩阵.

7.8 Young 算子与置换群不可约表示的基矢

令 $\Phi(1, 2, \cdots, n)$ 为一个函数，它在置换群 S_n 的元素 $s=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_n\end{pmatrix}$ 作用下变为另一个函数，即

$$\hat{P}(s)\Phi(1, 2, \cdots, n)=\Phi(i_1, i_2, i_3, \cdots, i_n)$$

函数 $\Phi(1, 2, \cdots, n)$ 的具体形式由所讨论体系的性质决定. 比如 n 个电子系统，由于电子的不可区分性，它们具有 S_n 群的对称性，即任意交换电子物理体系性质不变. 而每个电子的性质由自旋和空间的波函数 $\sigma(\alpha)\varphi(\boldsymbol{r})$ 决定. n 个电子体系的总波函数可表示为

$$\Phi(1, 2, \cdots, n) = \prod_{i=1}^{n}\sigma(\alpha_i)\varphi(\boldsymbol{r}_i)$$

这时 $\Phi(1, 2, \cdots, n)$ 为 n 个电子自旋-空间波函数的乘积.

函数 $\Phi(1, 2, \cdots, n)$，通过交换 $1, 2, \cdots, n$ 可得到 $n!$ 个函数，这 $n!$ 个函数集合 $\{\Phi(i_1, i_2, \cdots, i_n)\}$ 并不构成置换群 S_n 不可约表示的基，而通过 Young 算子可由它们产生某些不可约表示的基矢.

7.8.1 Young 算子

1. 对称算子 $\hat{S}$ 与反对称算子 $\hat{A}$

对称算子

$$\hat{S} = \sum_{P\in S_n} P \tag{7.8.1}$$

其中 P 为 S_n 群的任一置换. 定义反对称算子为

$$\hat{A} = \sum_{P\in S_n}(-1)^P P \tag{7.8.2}$$

显然它们作用于任意函数 $\Phi(1, 2, \cdots, n)$ 上可分别得到置换群 S_n 不可约表示 $[n]$ 和 $[1^n]$ 的基矢.

因为

$$\begin{aligned}\hat{S}\Phi(1, 2, \cdots, n) &= \{\Phi(1, 2, \cdots, n) + \Phi(2, 1, 3, \cdots, n)\\ &\quad + \cdots + \Phi(i_1, i_2, \cdots, i_n) + \cdots\}\end{aligned}$$

包括了 $1, 2, \cdots, n$ 所有可能排列的函数 $\Phi(i_1, i_2, \cdots, i_n)$ 的全部，一共 $n!$ 项. 此时以任意置换 $P=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots n\\ j_1 & j_2 & j_3 & \cdots j_n\end{pmatrix}$ 作用它得到

$$P\hat{S}\Phi(1, 2, \cdots, n) = \sum_{P'} PP'\Phi(1, 2, \cdots, n) = \hat{S}\Phi(1, 2, \cdots, n)$$

从而说明 $\hat{S}\Phi(1, 2, \cdots, n)$ 是 S_n 群全对称不可约表示 $[n]$ 的基矢.

而以 $\hat{A}$ 作用 $\Phi(1, 2, \cdots, n)$ 得到反对称表示 $[1^n]$ 的基，即

$$P\hat{A}\Phi(1, 2, \cdots, n) = \sum_{P'}(-1)^{P'}PP'\Phi(1, 2, \cdots, n)$$

以 P''记 PP'，则 P''的字称等于$(-1)^{P'+P}=(-1)^{P''}$，于是

$$P\hat{A}\Phi(1,2,\cdots,n)=\sum_{P''}(-1)^{P''+P}\Phi(1,2,\cdots,n)$$

$$=(-1)^{P}\hat{A}\Phi(1,2,\cdots,n)$$

这恰是 $\hat{A}\Phi(1,2,\cdots,n)$为不可约表示$[1^n]$的基矢的表示矩阵的形式.

实际上算子 $\hat{S}$ 和 $\hat{A}$ 是两个投影算子，它从 $n!$维的函数空间$\{\Phi(1,2,\cdots,n),\Phi(2,1,\cdots,n),\cdots,\Phi(i_1,i_2,\cdots,i_n),\cdots,\}$投影出了不可约表示$[n]$和$[1^n]$的基矢 $\hat{S}\Phi(1,2,\cdots,n)$和 $\hat{A}\Phi(1,2,\cdots,n)$.

2. Young 算子

把对称和反对称算子 $\hat{S}$ 和 $\hat{A}$ 推广到 S_n 群维数大于 2 的不可约表示$[\lambda]$，定义出与不可约表示$[\lambda]$相应的投影算子 $\hat{Y}_i^{[\lambda]}$. 使 $\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Phi(1,2,\cdots,n)$成为不可约表示$[\lambda]$的基矢. 称这种投影算子为 Young 算子.

S_n 群的每一个不可约表示$[\lambda]$对应一个 Young 图，而这个 Young 图又定义了 $d([\lambda])$个标准 Young 盘，这个标准 Young 盘利用字典顺序编为 $T_1^{[\lambda]}$, $T_2^{[\lambda]}$, …, $T_{d([\lambda])}^{[\lambda]}$. 如果$[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m]$$(m\leqslant n,\lambda_1\leqslant n)$，则每个标准 Young 盘有 m 行，λ_1 列. 对于第 i 个标准 Young 盘相应的定义 Young 算子为

$$\hat{Y}_i^{[\lambda]}=\hat{A}_i^{[\lambda]}\cdot\hat{S}_i^{[\lambda]}=\prod_j\sum_{P_j}(-1)^{P_j}P_j\cdot\prod_k\sum_{P_k}P_k \tag{7.8.3}$$

其中 P_j 是对标准 Young 盘 $T_i^{[\lambda]}$ 中第 j 列的数字的全部置换；P_k 是对标准 Young 盘 $T_i^{[\lambda]}$ 中第 k 行的所有数字的全部置换.

这样便对不可约表示$[\lambda]$定义了 $d([\lambda])$个 Young 算子.

下面举两个例子对 Young 算子加以说明.

1° S_2 群不可约表示[21]的 Young 算子

[21]的两个标准 Young 盘为

1	2
3	

$T_1^{[21]}$

1	3
2	

$T_2^{[21]}$

相应的 Young 算子为

$$\hat{Y}_1^{[21]}=[e-(1,3)][e+(1,2)]$$

$$\hat{Y}_2^{[21]}=[e-(1,2)][e+(1,3)]$$

2° S_4 群不可约表示$[21^2]$的 Young 算子

S_4 不可约表示$[21^2]$有三个标准 Young 盘：

1	2
3	
4	

$T_1^{[21^2]}$

1	3
2	
4	

$T_2^{[21^2]}$

1	4
2	
3	

$T_3^{[21^2]}$

它们相应的 Young 算子为

$$\hat{Y}_1^{[21^2]} = [e-(13)-(14)-(34)+(134)+(143)][e+(12)]$$

$$\hat{Y}_2^{[21^2]} = [e-(12)-(24)-(14)+(124)+(142)][e+(13)]$$

$$\hat{Y}_3^{[21^2]} = [e-(12)-(13)-(23)+(123)+(132)][e+(14)]$$

定理 7.8.1 在由 $n!$ 个函数 $\Phi_1(1, 2, 3, \cdots, n)$，$\Phi_1(2, 1, 3, \cdots, n)$，$\cdots$，$\Phi_1(i_1, i_2, \cdots, i_n)$，$\cdots$，为基矢构成的函数空间，用 Young 算子 $\hat{Y}_i^{[\lambda]}$ 可投影出 $d([\lambda])$ 个混合函数，它们荷载了 S_n 群不可约表示$[\lambda]$，表示基矢为

$$\Psi_i(1, 2, 3, \cdots, n) = \hat{Y}_i^{[\lambda]}\Phi_i(1, 2, \cdots, n), \quad i=1, 2, \cdots, d([\lambda]) \quad (7.8.4)$$

其中

$$\Phi_1(1, 2, 3, \cdots, n) = \Phi(1, 2, 3, \cdots, n)$$

$$\Phi_i(1, 2, \cdots, n) = P_i\Phi_1(1, 2, \cdots, n), \quad i = 2, 3, \cdots, d([\lambda]) \quad (7.8.5)$$

置换 P_i 是把标准 Young 盘 $T_1^{[\lambda]}$ 变为标准 Young 盘 $T_i^{[\lambda]}$ 的置换. 称这种表示为非标准表示或 Young 表示，这种基称为 Young 氏基矢.

这个定理本书不予证明，读者可参阅 Hamermesh 或 Rutherford 的著作. 下面只用两个例子予以说明.

例 1 S_3 群不可约表示[21]的基矢与表示矩阵.

前边已给出了 S_3 群不可约表示[21]的 Young 算子 $\hat{Y}_1^{[21]}$ 和 $\hat{Y}_2^{[21]}$. 由(7.8.5)式可得到

$$\Phi_1(123) = \Phi(123), \quad \Phi_2(123) = \Phi(132)$$

由(7.8.4)式得到

$$\begin{aligned}\Psi_1 = \hat{Y}_1^{[21]}\Phi_1(123) &= [e-(13)][e+(12)]\Phi(123)\\ &= \Phi(123)+\Phi(213)-\Phi(321)-\Phi(231)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Psi_2 = \hat{Y}_2^{[21]}\Phi_2(123) &= [e-(12)][e+(13)]\Phi(132)\\ &= \Phi(132)+\Phi(312)-\Phi(231)-\Phi(321)\end{aligned}$$

为了看到它们是不可约表示[21]的基矢，用生成元(1, 2)和(1, 3)作用它们，得到

$$\hat{P}(12)\Psi_1 = \Phi(213)+\Phi(123)-\Phi(312)-\Phi(132) = \Psi_1-\Psi_2$$

$$\hat{P}(12)\Psi_2 = \Phi(231)+\Phi(321)-\Phi(132)-\Phi(312) = -\Psi_2$$

因而表示矩阵为

$$D(12) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}(13)\Psi_1 = \Phi(321)+\Phi(231)-\Phi(213)-\Phi(123) = -\Psi_1$$

$$\hat{P}(13)\Psi_2 = \Phi(312)+\Phi(132)-\Phi(213)-\Phi(123) = \Psi_2-\Psi_1$$

由此得表示矩阵为

$$D(1, 3) = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

为了检查这个表示是不可约表示，要求出循环长度为 3 的类的表示矩阵. 由于

$$(132)=(12)(13)$$

因而

$$D(132)=D(12)\times D(13)=\begin{pmatrix}-1 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

于是得到这个表示的特标为

χ	(1^3)	(12)	(1)
	2	0	-1

可以验证

$$\frac{1}{n!}\sum_{S\in S_3}|\chi(S)|^2=1$$

即

$$\frac{1}{6}(2^2+21^2)=1$$

因而是不可约表示，由特征标表可判别它是不可约表示[21].

例 2　S_4 群不可约表示[31]的基矢与表示矩阵.

由(7.8.5)式得到

$$\Phi_1(1234)=\Phi(1234),\quad \Phi_2(1234)=\Phi(1324),\quad \Phi_3(1234)=\Phi(1423)$$

由 Young 算子得到 3 个基矢为

$$\Psi_1=\hat{Y}_1^{[21^2]}\Phi(1234),\quad \Psi_2=\hat{Y}_2^{[21^2]}\Phi(1324),\quad \Psi_3=\hat{Y}_3^{[21^2]}\Phi(1423)$$

因具体表达式比较长就不写了. 由它们可得到生成元的表示矩阵为

$$D(12)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ -1 & -1 & 0\\ 1 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$D(13)=\begin{pmatrix}-1 & -1 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & -1 & -1\end{pmatrix}$$

$$D(14)=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 1\\ 0 & -1 & -1\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

对循环长度为 3 的置换(132)=(12)(13)得到

$$D(132)=D(12)D(13)=\begin{pmatrix}-1 & -1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

对循环结构为(2^2)的元素(14)(23)=(14)(132)(12)，因而

$$D((14)(23))=\begin{pmatrix}0 & -1 & -1\\ -1 & 0 & 1\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

循环长度为 4 的循环(1432) = (12)(13)(14)，于是

$$D((1432)) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

这样便得到了这个表示的特征标：

χ	(1^4)	$(1^2, 2)$	$(1, 3)$	(2^2)	(4)
	3	−1	0	−1	1

由特征标表可判断它为不可约表示$[21^2]$.

由这些例子可看出这种表示不是酉表示，它是这种非标准表示的不好之处. 但是，这种表示的 Young 算子很容易由标准 Young 盘得到，因而便于构造不可约表示基矢和求出表示矩阵.

7.8.2 标准 Young 算子与标准表示

在 7.7 节中讨论的标准表示是实酉表示，这种表示的基矢可由标准 Young 算子得到. 标准 Young 算子就是由标准表示矩阵定义的投影算子.

在第四章(4.2.4)式定义了一般有限群的投影算子

$$\hat{P}_{ij}^{(\Gamma)} = \sqrt{\frac{\lambda(\Gamma)}{N}} \sum_{g \in G} D^{(\Gamma)}(g)_{ij}^{*} \hat{P}(g)$$

(4.2.4)式中的投影算子求和号前边为$\frac{\lambda(\Gamma)}{N}$，这里写为$\sqrt{\frac{\lambda(\Gamma)}{N}}$，是归一化的投影算子. 相应的标准 Young 算子为

$$\hat{Y}_{(r)(r')}^{[\lambda]} = \sqrt{\frac{d([\lambda])}{n!}} \sum_{P \in S_n} \langle [\lambda](r) \mid \hat{P} \mid [\lambda](r') \rangle \hat{P} \tag{7.8.6}$$

利用这种标准 Young 算子可由函数 $\Phi(1, 2, \cdots, n)$ 中投影出标准表示的基矢.

下面只举 S_3 群不可约表示[21]的标准表示矩阵，它们为

$$D^{[21]}(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D^{[21]}(12) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$D^{[21]}(13) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad D^{[21]}(23) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$D^{[21]}(123) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad D^{[21]}(132) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

由此可得到标准 Young 算子

$$\hat{Y}_{11}^{[21]} = \sqrt{\frac{1}{3}}\left[e + (12) - \frac{1}{2}(13) - \frac{1}{2}(23) - \frac{1}{2}(123) - \frac{1}{2}(132)\right]$$

$$\hat{Y}_{21}^{[21]}=\frac{1}{2}[-(13)+(23)-(123)+(132)]$$

把它们作用于函数 $\Phi(123)$ 得到

$$\begin{aligned}\Psi_1(123)&=\hat{Y}_{11}^{[21]}\Phi(123)\\&=\sqrt{\frac{1}{3}}\Big(\Phi(123)+\Phi(213)-\frac{1}{2}\Phi(321)-\frac{1}{2}\Phi(132)\\&\quad-\frac{1}{2}\Phi(231)-\frac{1}{2}(312)\Big)\\\Psi_2(123)&=\hat{Y}_{21}^{[21]}\Phi(123)\\&=\frac{1}{2}[-\Phi(321)+\Phi(132)-\Phi(231)+\Phi(312)]\end{aligned}$$

用生成元(12)和(13)作用它们，得到：

$$\begin{aligned}\hat{P}(12)\Psi_1(123)&=\Psi_1\\\hat{P}(12)\Psi_2(123)&=-\Psi_2\\\hat{P}(13)\Psi_1(123)&=-\frac{1}{2}\Psi_1-\frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_2\\\hat{P}(13)\Psi_2(123)&=-\frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_1+\frac{1}{2}\Psi_2\end{aligned}$$

显然这组基矢是不可约表示[21]的标准基，由它们立即得到前面所列出的标准表示矩阵.

7.9　置换群表示理论对 Fermi 子体系的应用

同一类微观粒子是不可区分的(粒子全同性原理)，因而由 n 个同类粒子所构成的 n 粒子体系具有 S_n 群的置换对称性. Fermi 子遵循 Pauli 不相容原理，因而它们的状态对交换粒子是全反对称的，属于 S_n 群不可约表示 $[1^n]$. 故此构造全反对称性波函数对解决 Fermi 子体系是十分重要的问题. 比如对于电子，单电子波函数由轨道函数和自旋函数之积构成，即 $\sigma(\alpha)\varphi(\boldsymbol{r})$，$\sigma(\alpha)$ 为自旋波函数，自旋变量 α 取 $\pm\frac{1}{2}$，它标记自旋分量为 $\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$. 因而 n 个电子的波函数可写为

$$\Phi(1,2,\cdots,n)=\prod_{i=1}^{n}\sigma_i(\alpha_i)\varphi_i(\boldsymbol{r}_i)$$

为了得到反对称函数可用反对称算子 $\hat{A}$ 作用 Φ 而得到，即

$$\begin{aligned}\varphi(1,2,\cdots,n)&=\hat{A}\Phi(1,2,\cdots,n)\\&=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{P\in S_n}(-1)^P P\prod_i\sigma(\alpha_i)\varphi(\boldsymbol{r}_i)\end{aligned}$$

$$
= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \sigma_1(\alpha_1)\varphi_1(r_1) & \sigma_2(\alpha_1)\varphi_2(r_1) & \cdots & \sigma_n(\alpha_1)\varphi_n(r_1) \\ \sigma_1(\alpha_2)\varphi_1(r_2) & \sigma_2(\alpha_2)\varphi_2(r_2) & \cdots & \sigma_n(\alpha_2)\varphi_n(r_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sigma_1(\alpha_n)\varphi_1(r_n) & \sigma_2(\alpha_n)\varphi_2(r_n) & \cdots & \sigma_n(\alpha_n)\varphi_n(r_n) \end{vmatrix}
$$

通常称为 Slater 函数.

下面讨论置换群对 n 个费米子体系，或明确说对 n 个电子构成的物理体系中进一步应用的问题.

7.9.1 由总自旋函数和总轨道函数构成的全反对称函数

如果 n 个电子体系相互作用哈密顿算子 $\hat{H}$ 与自旋无关，即

$$[\hat{S}_\alpha, \hat{H}] = 0$$

$\hat{S}_\alpha$ 为自旋算子的 α 分量，则总自旋角动量 S^2 和它的 z 分量 $\hat{S}_z$ 是好量子数，而且哈密顿算子 $\hat{H}$ 对置换 n 个电子坐标 r_i 是不变的，即 $\hat{H}$ 具有空间坐标的置换对称性. 因而把 n 个电子的自旋函数组合成 S_n 群一定的不可约表示$[\lambda]$的基，把空间波函数组合成 S_n 群一定的不可约表示$[\mu]$的基. 然后，由它们的直积组合成 S_n 群不可约表示$[1^n]$的基，对于求解这个体系的 Schrodinger 方程将是十分方便的.

这便涉及到 S_n 群不可约表示$[\lambda]$与$[\mu]$的直积分解为不可约表示$[1^n]$的问题，即

$$[\lambda]\otimes[\mu]\supset[1^n]$$

也就是说对一定的不可约表示$[\lambda]$，哪些不可约表示$[\mu]$使得直积表示$[\lambda]\otimes[\mu]$包括不可约表示$[1^n]$，而且只包括一次.

在第一章 12 节中已讨论了直积表示的分解问题，即

$$[\omega] = [\lambda]\otimes[\mu] = \sum_\nu a_\nu(\lambda, \mu)[\nu]$$

其中 $a_\nu(\lambda, \mu)$为不可约表示$[\nu]$在直积分解的重复度. 由(1.12.16)式得到

$$a_\nu(\lambda, \mu) = \frac{1}{n!}\sum_S \chi^{[\omega]}\chi^{[\nu]}$$

因为 S_n 群不可约表示是实的$\chi^{[\nu]*} = \chi^{[\nu]}$. 而直积表示$[\lambda]\otimes[\mu]$的特征标为

$$\chi^{[\omega]} = \chi^{[\lambda]} \cdot \chi^{[\mu]}$$

如果$[\mu]$为$[\lambda]$的共轭表示，即$[\mu] = [\tilde{\lambda}]$，则

$$[\lambda]\otimes[\tilde{\lambda}]$$

只包括不可约表示$[1^n]$一次. 因为

$$a_{[1^n]}(\lambda, \tilde{\lambda}) = \frac{1}{n!}\sum_S \chi^{[\lambda]}(g) \cdot \chi^{[\tilde{\lambda}]}(g) \cdot \chi^{[1^n]}(g)$$

由(7.5.7)式

$$\chi^{[\tilde{\lambda}]}(g) = \chi^{[\lambda]}(g) \cdot \chi^{[1^n]}(g)$$

于是

$$a_{[1^n]}(\lambda, \tilde{\lambda}) = \frac{1}{n!}\sum_S \chi^{[\lambda]}(g) \cdot \chi^{[\lambda]}(g) \cdot \chi^{[1^n]}(g)^2$$

$$=\frac{1}{n!}\sum_{S}\chi^{[\lambda]}(g)\cdot\chi^{[\lambda]}(g)=1 \qquad (7.9.1)$$

如果以 $\Phi_{(r)}^{[\lambda]}$ 表示空间函数构成的不可约表示$[\lambda]$的标准基，(r)为 Y-符号，以$\textcircled{H}_{(\tilde{r})}^{[\tilde{\lambda}]}$表示自旋函数构成的不可约表示$[\tilde{\lambda}]$的标准基，则由它们的线性组合可构成不可约表示$[1^n]$的基：

$$\Psi^{[1^n]}=\sum_{r=1}^{d([\lambda])}\sum_{s=1}^{d([\lambda])}C^{[1^n]}(\lambda)_{rs}\Phi_{(r)}^{[\lambda]}\textcircled{H}_{(\tilde{s})}^{[\tilde{\lambda}]} \qquad (7.9.2)$$

系数 $C_{rs}^{[1^n]}(\lambda)$实际是 S_n 群的 C-G 系数，比照 $SO(3)$群或点群，这种 S_n 群的 C-G 系数 $C_{rs}^{[1^n]}(\lambda)$也可写为$(\lambda r.\ \tilde{\lambda}s|1^{[n]})$.

我们不加证明地给出(7.9.2)式的最后表达式

$$\Psi^{[1^n]}=\sum_{r=1}(-1)^{R(r)}\Phi_{(r)}^{[\lambda]}\textcircled{H}_{(\tilde{r})}^{[\tilde{\lambda}]} \qquad (7.9.3)$$

其中 $R(r)$是 Y-符号(r)变为数字从左至右按大小顺序排列所经历的置换的宇称.

下面举两个简例，说明(7.9.3)式的应用.

例 1　S_3 群的自旋-轨道全反对称基矢.

S_3 不可约表示$[1^3]$与$[3]$互为共轭表示，$[21]$是自共轭表示. 因而 3 个电子的自旋-轨道全反对称波函数有两种，第一种是平庸的，即

$$\Psi^{[1^3]}=\Phi^{[3]}\cdot\textcircled{H}^{[1^3]}\quad 或\quad \Phi^{[1^3]}\cdot\textcircled{H}^{[3]}$$

第一种自旋为反对称，轨道为全对称;第二种自旋为全对称，轨道为全反对称.

下面讨论自旋与轨道都为不可约表示$[21]$的全反对称波函数. 由(7.9.3)式得到

$$\begin{aligned}\Psi^{[1^3]}&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left((-1)^{R(211)}\Phi_{(211)}^{[21]}\textcircled{H}_{(\tilde{2}\tilde{1}1)}^{[\tilde{2}\tilde{1}]}+(-1)^{R(121)}\Phi_{(121)}^{[21]}\textcircled{H}_{(1\tilde{2}1)}^{[\tilde{2}\tilde{1}]}\right)\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Phi_{(211)}^{[21]}\textcircled{H}_{(\tilde{2}\tilde{1}1)}^{[\tilde{2}\tilde{1}]}-\Phi_{(121)}^{[21]}\textcircled{H}_{(1\tilde{2}1)}^{[\tilde{2}\tilde{1}]}\right)\end{aligned} \qquad (7.9.4)$$

因为(121)→(211)需进行一次(12)的对换；于是$(-1)^{R(121)}=-1$，Y-符号$(2\tilde{1}1)=(121)$，$(1\tilde{2}1)=(211)$.

在上节中已给出了

$$\Phi_{(211)}^{[21]}=\hat{Y}_1^{[21]}\Phi(123)=\Phi(123)+\Phi(213)-\Phi(321)-\Phi(231)$$

$$\Phi_{(121)}^{[21]}=\hat{Y}_2^{[21]}\Phi(123)=\Phi(132)+\Phi(312)-\Phi(231)-\Phi(321)$$

而$\textcircled{H}_{(\tilde{r})}^{[\tilde{2}\tilde{1}]}$为标准 Young 盘

$$\tilde{T}_1=\widetilde{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}}=\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\qquad\qquad \tilde{T}_2=\widetilde{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}}=\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$$

的 Young 算子得到的基矢，这种 Young 算子为

$$\hat{Y}_1^{[\tilde{2}\tilde{1}]}=[e-(12)][e+(13)]$$

$$\hat{Y}_2^{[\tilde{2}\tilde{1}]}=[e-(13)][e+(12)]$$

因而

$$\textcircled{H}^{[\tilde{2}\tilde{1}]}_{(2\tilde{1}1)} = \hat{Y}_1^{[\tilde{2}\tilde{1}]}\textcircled{H}(123) = \textcircled{H}(123) + \textcircled{H}(321) - \textcircled{H}(213) - \textcircled{H}(312)$$

$$\textcircled{H}^{[\tilde{2}\tilde{1}]}_{(1\tilde{2}1)} = \hat{Y}_2^{[\tilde{2}\tilde{1}]}\textcircled{H}(132) = \textcircled{H}(132) + \textcircled{H}(231) - \textcircled{H}(312) - \textcircled{H}(213)$$

把它们代入(7.9.4)式就得到了基矢 $\Psi^{[1^3]}$.

例 2 S_4 群的自旋轨道全反对称基矢.

S_4 群除$[4]$与$[1^4]$互为共轭表示外，$[21^2]$与$[31]$互为共轭表示，$[2^2]$为自共轭表示. 因之除了平庸的全反对称不可约表示 $\Psi^{[1^4]} = \Phi^{[1^4]} \cdot \textcircled{H}^{[4]}$和 $\Phi^{[4]} \cdot \textcircled{H}^{[1^4]}$之外，尚有两种全反对称表示：

(1) $[\lambda] = [21^2]$, $[\tilde{\lambda}] = [31]$

$$\begin{aligned}\Psi^{[1^4]} &= \frac{1}{\sqrt{3}}[(-1)^{R(321)}\Phi^{[211]}_{(3211)}\textcircled{H}^{[\tilde{3}\tilde{1}]}_{(3\tilde{2}11)} \\ &\quad + (-1)^{R(312)}\Phi^{[211]}_{(3121)}\textcircled{H}^{[\tilde{3}\tilde{1}]}_{(31\tilde{2}1)} + (-1)^{R(132)}\Phi^{[211]}_{(1321)}\textcircled{H}^{[\tilde{3}\tilde{1}]}_{(13\tilde{2}1)}] \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}[\Phi^{[211]}_{(3211)}\textcircled{H}^{[\tilde{3}\tilde{1}]}_{(3\tilde{2}11)} - \Phi^{[211]}_{(3121)}\textcircled{H}^{[\tilde{3}\tilde{1}]}_{(31\tilde{2}1)} + \Phi^{[211]}_{(1321)}\textcircled{H}^{[\tilde{3}\tilde{1}]}_{(13\tilde{2}1)}]\end{aligned}$$

在上节中已给出了 Young 算子 $\hat{Y}_i^{[2\tilde{1}1]}$，$i=1$ 代表(3211)，$i=2$ 代表(3121)，$i=3$ 代表(1321)和相应的 $\Phi^{[211]}_{(3211)}$，$\Phi^{[211]}_{(3121)}$，$\Phi^{[211]}_{(1321)}$. 这里只须注意

$$\tilde{T}_1^{[211]} = \widetilde{\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1} 4 \\ \cline{1-1}\end{array}} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array} \qquad \tilde{T}_2^{[211]} = \widetilde{\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} 4 \\ \cline{1-1}\end{array}} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}$$

$$\tilde{T}_3^{[211]} = \widetilde{\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 4 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1} 3 \\ \cline{1-1}\end{array}} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 \\ \cline{1-1}\end{array}$$

因而 Young 算子为

$$\begin{aligned}\hat{Y}_1^{[2\tilde{1}1]} &= [e-(12)] \\ &\quad [e+(13)+(14)+(34)+(134)+(143)] \\ \hat{Y}_2^{[2\tilde{1}1]} &= (e-(13)) \\ &\quad (e+(12)+(14)+(24)+(124)+(142)) \\ \hat{Y}_3^{[2\tilde{1}1]} &= [e-(14)] \\ &\quad [e+(12)+(13)+(23)+(123)+(132)]\end{aligned}$$

这里 1 代表(1121) = $(3\tilde{2}11)$，2 代表(1211) = $(13\tilde{2}1)$，3 代表(2111) = $(31\tilde{2}1)$. 从而可具体得到 $\Phi^{[211]}_{(r)}$，$\textcircled{H}^{[\tilde{2}\tilde{1}1]}_{(\tilde{r})}$，于是就可具体求出相应的 $\Psi^{[1^4]}$.

(2) $[\lambda] = [22]$

$$\Psi^{[1^4]} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi^{[21]}_{(2211)}\textcircled{H}^{[\tilde{2}\tilde{2}]}_{(22\tilde{1}1)} - \Phi^{[22]}_{(2121)}\textcircled{H}^{[\tilde{2}\tilde{2}]}_{(21\tilde{2}1)}]$$

$[2^2]$的标准 Young 盘为

$$T_1^{[22]} = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array} \qquad T_2^{[22]} = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array}$$

$$T_1^{[22]} = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline\end{array} \qquad T_2^{[22]} = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline\end{array}$$

由此可计算出相应的 $\Psi^{[1^4]}$.

后面将看到自旋函数$\Theta_{(r)}^{[\lambda]}$，只存在$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, 0, \cdots, 0]$，即允许的不可约表示$[\lambda]$只能为两行的表示.

7.9.2　置换群的外积与自旋函数

1. 外积

观察两个原子构成的体系. 第一个原子有 n_1 个电子，第二个原子 n_2 个电子，当两个原子之间没有相互作用时，第一个原子的 n_1 个电子波函数可由 S_{n_1} 群不可约表示$[\lambda]$的基矢 $\Psi_r^{[\lambda]}$ 构成. 第二个原子的 n_2 个电子波函数可由 S_{n_2}群不可约表示$[\mu]$的基矢 $\Psi_{(s)}^{[\mu]}$ 构成. 当它们结合成分子时，则 n_1+n_2 个电子便由 $S_{n_1+n_2}$群的不可约表示的基矢来描述. 这时，可从 n_1+n_2 个电子中任意取出 n_1 个电子，用它们构成 S_{n_1}群的不可约表示的基，剩下的 n_2 个电子构成 S_{n_2}群的基，这种取法有$\begin{pmatrix} n_1+n_2 \\ n_1 \end{pmatrix} = \dfrac{(n_1+n_2)!}{n_1!n_2!}$种，因而积函数 $\Psi_{(r)}^{[\lambda]}$ $\Psi_{(s)}^{[\mu]}$就有 N 种，N 为

$$N = \frac{(n_1+n_2)!}{n_1!n_2!} d([\lambda])d([\mu]) \tag{7.9.5}$$

由这 N 种积函数的线性组合构造 $S_{n_1+n_2}$群的各种不可约表示$[\nu_1]$，$[\nu_2]$，…，的基矢. 称这种处理为置换群 S_{n_1}的不可约表示$[\lambda]$与置换群 S_{n_2}不可约表示的外积，外积用符号$\odot$表示，即$[\lambda]\odot[\mu]$. 它们可分解为 $S_{n_1+n_2}$群不可约表示$[\nu]$的直和，即

$$[\lambda]\odot[\mu] = \sum_{\nu} a(\lambda, \mu)_{\nu}[\nu] \tag{7.9.6}$$

$[\lambda]$，$[\mu]$和$[\nu]$分别为 S_{n_1}，S_{n_2}和 $S_{n_1+n_2}$群的不可约表示.

这种外积分解也可由 Young 图来表示. 下面不加证明地给出外积分解的图形规则.

外积分解规则：

外积$[\lambda]\odot[\mu]$分解为 $S_{n_1+n_2}$群的不可约表示时，可画出 S_{n_1}群不可约表示$[\lambda]$的 Young 图，然后把 S_{n_2}的不可约表示$[\mu]$的 n_2 个方块用各种方法尽可能地加到 Young 图$[\lambda]$之上，构成的所有可能的 Young 图$[\nu]$，即为外积分解 $S_{n_1+n_2}$群各种不可约表示的直和，在这种相加过程中有 3 点限制，即

（1）所得图形必须是允许的 Young 图，而且在填充方块的全部过程中也必须都是允许的 Young 图；

（2）如果$[\mu]=[n_2]$（即一行的 Young 图），在把 n_2 个方块加入 Young 图$[\lambda]$上时，不能有两个同一行的方块同时出现在一列中；

(3) 若$[\mu]=[1^{n_2}]$（即一列的 Young 图），则不能在同一行中加入两个方块.

下面举例对这种图形分解规则加以说明.

例 1 [21]⊙[2]，即

由此得到

$$
\underset{(2)}{[21]}\odot\underset{(1)}{[2]}=\underset{(4)}{[41]}\oplus\underset{(5)}{[32]}\oplus\underset{(6)}{[31^2]}\oplus\underset{(5)}{[2^21]}
$$

由(7.9.5)式得到外积[21]⊙[2]的维数为 20，S_5 群不可约表示直和的维数也是 20(上式不可约表示符号下面是维数).

例 2 $[21]\odot[1^3]$，即

$$
\underset{(2)}{[21]}\odot\underset{(1)}{[1^3]}=\underset{(5)}{[21^4]}\oplus\underset{(9)}{[2^21^2]}\oplus\underset{(10)}{[31^3]}\oplus\underset{(16)}{[321]},N=\frac{6!}{3!2!}2=40
$$

外积$[21]\odot[1^3]$的总维数为 40.

例 3 [21]⊙[21]，即

$$
\underset{(2)}{[21]}\odot\underset{(2)}{[21]}=\underset{(5)}{[3^2]}\oplus\underset{(9)}{[42]}\oplus\underset{(16)}{2[321]}\oplus\underset{(5)}{[2^3]}\oplus\underset{(10)}{[41^2]}\oplus\underset{(9)}{[2^21^2]}\oplus\underset{(10)}{[31^3]}
$$

$$
N=\frac{6!}{3!3!}4=80
$$

按方块填充原则只能出现两个[321]，其它改变 α, β, γ 时，都违背原则(1)，(2)或(3). 如存在 6 种$[3^2]$，它们为

其中第一、二个同一列的 α, β 填在了同一行上违背了原则(3)，第三个填充过程必须是先填为 α, β，再取 γ 填充为 α, β, γ，因为在填充中不能先取方块 α，此时已破坏了 Young 图的标准，违背了原则(1). 第六个原来同一 β, α 填在了同一列上，违背了原则(2).

2. 自旋函数的构造

用 α 和 β 表示单电子的自旋函数，α 表示 $S_z=\frac{1}{2}$，β 表示 $S_z=-\frac{1}{2}$. 一个电子的自旋函数 α 或 β 当然是 S_1 群不可约表示[1]的基，因而当考虑两个电子的自旋时，即为[1]与[1]的外积，也就是

$$\yng(1)\odot\yng(1)=\yng(2)\oplus\yng(1,1)$$

即

$$[1]\odot[1]=[2]\oplus[1^2]$$

$[1^2]$为反对称表示，它的基为

$$\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)$$

此为总自旋为 0 的自旋波函数，而[2]对全部对称基，它可写为 $\alpha(1)\alpha(2)$，$\beta(1)\beta(2)$ 或 $\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)$，它们是总自旋为 1 的波函数. 因而[2]代表自旋为 1，$[1^2]$代表自旋为 0.

当考虑 3 个电子的自旋函数时，可分两种情况讨论.

其一是

$$\yng(1,1)\odot\yng(1)=\yng(2,1)\oplus\yng(1,1,1)$$

由于自旋函数仅有 α，β 对三电子体系 $\alpha(i)$，$\beta(i)$（$i=1,2,3$ 代表电子编号），此时任取 $\alpha(i)$，$\beta(j)$，$\beta(k)$ 或 $\alpha(i)$，$\alpha(j)$，$\beta(k)$（$i,j,k=1,2,3$）. 利用它们的任意组合不可能构成全反对称函数，即全反对称表示$[1^3]$不可能存在，因而对自旋函数，外积$[1^2]\odot[1]$只能是

$$\yng(1,1)\odot\yng(1)=\yng(2,1)$$

[21]代表自旋为$\frac{1}{2}$.

其二是

$$\yng(2)\odot\yng(1)=\yng(2,1)\oplus\yng(3)$$

[3]代表自旋为$\frac{3}{2}$，即 $S_1=1$ 与 $S_2=\frac{1}{2}$，相加得到 $S=\frac{1}{2}$，$\frac{3}{2}$符合角动量加法规则.

第八章　全同核置换反演群与分子对称群及其在分子光谱中的应用

在第二章和第三章中讨论了描述分子对称性的分子点群及其表示问题. 严格来讲分子点群只能描述刚性分子的对称性，作为一种近似，可以近似地描述准刚性分子的对称性. 所谓准刚性分子是指构成分子的原子核(或者原子实)在平衡位置附近微小的振动. 在上世纪60年代之前几乎全部分子光谱群论都是在此基础建立的. 随着分子光谱学的发展，需要研究非刚性分子的原子核在平衡位置周围大幅度运动的情况. 这就需要发展分子对称性的描述，从而发展了分子对称群(SM)和全同核置换反演群(CNPI). 在本章将对CNPI群的SM群做一些基础性的讨论. 有兴趣读者可参阅Bunker, P. R著“Molecular Symmetry and Spectroscopy”Academic Press(1979).

8.1　分子Hamiltonian群与全同核置换反演群

8.1.1　分子Hamiltonian及其对称群

1. 分子Hamiltonian

一个由n个电子、N个核组成的具有相互作用的分子的精确Hamiltonian可表示为

$$H = T + V + H_{es} + H_{hfs} \tag{8.1.1}$$

其中，第一项T是动能部分，第二项V是核与电子、核与核之间和电子与电子之间相互作用的势能，后两项是磁矩之间的相互作用，其中，H_{es}为电子自旋以及电子自旋与荷电粒子轨道运动间的相互作用；H_{hfs}为核自旋间以及核自旋和荷电粒子轨道运动间的相互作用. 磁矩之间相互作用的数量级比电荷相互作用小，一般不予考虑. 但在讨论分子光谱的精细结构和超精细结构时，必须予以考虑.

(8.1.1)式中的诸项可以具体表示成

$$T = -\sum_{\alpha}\frac{1}{2m_{\alpha}}\nabla_{\alpha}^{2} - \sum_{i}\frac{1}{2m_{e}}\nabla_{i}^{2} \tag{8.1.2}$$

$$T = \sum_{\alpha<\beta}\frac{Z_{\alpha}Z_{\beta}e^{2}}{R_{\alpha\beta}} + \sum_{i<j}\frac{e^{2}}{R_{ij}} - \sum_{\alpha,i}\frac{Z_{\alpha}e^{2}}{R_{\alpha i}} \tag{8.1.3}$$

$$\begin{aligned} H_{es} = &\frac{g\mu_B}{C}\sum_{i<j}(-e)R_{ij}^{-3}\left[(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_j)\times\left(\frac{\boldsymbol{R}_i}{2m_e} - \frac{\boldsymbol{R}_j}{m_e}\right)\right]\cdot \boldsymbol{S}_i \\ &+ \frac{g\mu_B}{C}\sum_{i,\alpha}(Z_{\alpha}e)R_{\alpha j}^{-3}\left[(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_{\alpha})\times\left(\frac{\boldsymbol{R}_i}{2m_e} - \frac{\boldsymbol{R}_{\alpha}}{m_{\alpha}}\right)\right]\cdot \boldsymbol{S}_i \\ &+ g^2\mu_B^2\sum_{i<j}\{(\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j)R_{ij}^{-3} - 3R_{ij}^{-5}[\boldsymbol{S}_i\cdot(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_j)] \end{aligned}$$

$$\cdot [S_j \cdot (R_i - R_j)] - \frac{8\pi}{3}\delta(R_i - R_j)(S_i \cdot S_j)\} \tag{8.1.4}$$

其中

$$\mu_B = \frac{e}{2m_e C} \tag{8.1.5}$$

$$\mu_\alpha = \frac{e}{2m_\alpha C} = \frac{m_P}{m_\alpha}\left(\frac{e}{2m_P C}\right) = \frac{m_P}{m_\alpha}\mu_N \tag{8.1.6}$$

H_{es}中第一项表示的是第 i 个电子自旋 S_i 产生的磁矩阵与第 j 个电子相对第 i 个电子运动产生的磁矩之间的相互作用，并对 $i \neq j$ 的所有电子求和，这第一项的物理意义是代表电子的自旋与电子轨道运动的相互作用，相当于旋-轨耦合；第二项代表第 i 个电子与第 α 个核运动轨道间的旋-轨耦合；第三项代表电子磁矩之间的相互作用，即旋-旋耦合；第四项是代表 $i=j$ 时，电子本身由于接触而产生的势能.

H_{hfs}包括两部分

$$H_{hfs} = H_{ns} + H_{quad} \tag{8.1.7}$$

H_{ns}可类似于 H_{es}用下述表达式叙述：

$$\begin{aligned} H_{ns} = & \sum_{\alpha<\beta} \frac{g_\alpha \mu_\alpha}{C}(Z_\beta e) R_{\alpha\beta}^{-3}\left[(R_\alpha - R_\beta) \times \left(\frac{R_\alpha}{2m_\alpha} - \frac{R_\beta}{m_\beta}\right)\right] \cdot I_\alpha \\ & + \sum_{\alpha, i} \frac{g_\alpha \mu_\alpha}{C}(-e) R_{\alpha i}^{-3}\left[(R_\alpha - R_i) \times \left(\frac{R_\alpha}{2m_\alpha} - \frac{R_i}{m_e}\right)\right] \cdot I_\alpha \\ & + \sum_{\alpha<\beta} g_\alpha g_\beta \mu_\alpha \mu_\beta \{(I_\alpha \cdot I_\beta) R_{\alpha\beta}^{-3} - 3R_{\alpha\beta}^{-5}[(R_\alpha \cdot R_\beta) \cdot I_\alpha] \\ & \cdot [(R_\alpha - R_\beta)] \cdot I_\beta - \frac{8\pi}{3}\delta(R_\alpha - R_\beta)(I_\alpha \cdot I_\beta)\} \end{aligned} \tag{8.1.8}$$

H_{ns}表达式中 4 项的物理意义与 H_{es}的 4 项相似，第一项代表的是 α 核产生的磁矩与 β 核相对运动产生的磁矩之间的相互作用；第二项代表的是核与电子运动的作用能；第三项是核的自旋-自旋相互作用；第四项是核接触能. 但由于核自旋比较复杂，不像电子自旋只有 1/2，当核自旋为 0 时，虽然 $H_{ns}=0$，但此时仍有四极矩的贡献，$H_{quad} \neq 0$，一般地有

$$H_{quad} = -\frac{1}{6}\sum_{\alpha, a, b} Q_{ab}^{(\alpha)} V_{ab}^{(\alpha)} \tag{8.1.9}$$

代表的是四极矩的贡献，其中 Q_{ab}为四极矩，是二级张量

$$Q = \begin{pmatrix} Q_{xx} & Q_{xy} & Q_{xz} \\ Q_{yx} & Q_{yy} & Q_{yz} \\ Q_{zx} & Q_{zy} & Q_{zz} \end{pmatrix} \tag{8.1.10}$$

V_{ab}也有 9 个分量.

$$V_{xx} = \frac{\partial}{\partial x}F_x \tag{8.1.11}$$

(8.1.9)式表示对 Q 与 V 9 个分量两两相乘的积求和，这是包括了分子中全部作用的严格的分子 Hamiltonian.

2. 分子 Hamiltonian 的对称群

(8.1.1)式给出的分子 Hamiltonian 对如下的 6 种变换(或称操作)具有对称性.

平移 整个分子在空间向某个方向移动，即分子质心移动一个矢量 $\boldsymbol{A}$，设 $\hat{P}$ 为平移算子，$\boldsymbol{R}$ 为这一矢量，则有

$$\hat{P}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R} + \boldsymbol{A}$$

$$\hat{P}(\boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{R}_2) = (\boldsymbol{R}_1 + \boldsymbol{A}) - (\boldsymbol{R}_2 + \boldsymbol{A}) = \boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{R}_2$$

$$\hat{P}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{R} + \boldsymbol{A})}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t}$$

这表明平移算子不改变两个矢量之差，也不改变动量，因而 Hamiltonian 在平移操作下不变. 这说明外部空间是均匀的，质心处在什么位置，对 Hamiltonian 没有影响，所有平移构成一个群——平移群 G_T，它是三维空间连续的 Abel 群，与 Hamiltonian 对易.

转动 绕通过质心任何方向的一个轴的转动，是整个分子的转动，这种操作使整个分子的 Hamiltonian 不变. 转动可表示成一个 3×3 的正交矩阵，设 $\hat{P}$ 为转动算子，有

$$\hat{P}\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = A\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

在转动下，两个矢量的标量积不变. 距离可表示成两个矢量的标量积，故在转动下两点间的距离保持不变.

$$\hat{P}(\boldsymbol{R}_1 \cdot \boldsymbol{R}_2) = \boldsymbol{R}_1 A^+ A \boldsymbol{R}_2 = \boldsymbol{R}_1 \cdot \boldsymbol{R}_2$$

$$\hat{P}[\boldsymbol{R}_1(\boldsymbol{R}_2 \times \boldsymbol{R}_3)] = \left| A\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \\ z_1 & z_2 & z_3 \end{pmatrix} \right| = \begin{vmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \\ z_1 & z_2 & z_3 \end{vmatrix}$$

$$= \boldsymbol{R}_1 \cdot (\boldsymbol{R}_2 \times \boldsymbol{R}_3)$$

$$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla$$

$$\boldsymbol{R}_{12}^2 = (\boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{R}_2) \cdot (\boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{R}_2)$$

以上说明自旋-轨道耦合在转动下保持不变，四极矩也不变. 这反映出空间是均匀的，没有一个方向有特殊性，转动操作与整个分子 Hamiltonian 是交换的. 所有三维空间的这种转动构成一个群——三维空间的旋转群 G_R，这个群使分子的 Hamiltonian 保持不变，并与 Hamiltonian 对易.

置换电子坐标 两个电子的交换，使分子的 Hamiltonian 保持不变.

例如：

$$\hat{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ b_{a_1} & b_{a_2} & \cdots & b_{a_n} \end{pmatrix}$$

则

$$\hat{P}_2 \cdot \hat{P}_1 = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ b_{a_1} & b_{a_2} & \cdots & b_{a_n} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ b_{a_1} & b_{a_2} & \cdots & b_{a_n} \end{pmatrix}$$

即 $S_n^{(e)} = \{E, \hat{P}_1, \hat{P}_2, \cdots\}$ 为电子置换群，有 $n!$ 个元素.

置换相同核(坐标和自旋)　等同核的置换包括坐标和自旋的置换. 例如，$A_aB_bC_c$ 分子含有 a 个等同的 A 核，b 个等同的 B 核，c 个等同的 C 核，它的全同核置换群

$$\text{CNP} = S_a^{(A)} \otimes S_b^{(B)} \otimes S_c^{(C)}$$

CNP 群保持 Hamiltonian 不变，与 Hamiltonian 对易.

反演　反演操作使矢量和动量改变符号，但保持自旋和角动量不变. 设 $\hat{I}$ 为反演算子，有

$$\hat{I}\boldsymbol{R} = -\boldsymbol{R}$$

$$\hat{I}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t}$$

$$\hat{I}\left(\boldsymbol{R} \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t}\right) = \boldsymbol{R} \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t}$$

在反演动作下，整个 Hamiltonian 不变.

时间倒反　时间倒反操作，只使时间反演，不改变空间. 设 $\hat{K}$ 为时间反演算子，有

$$\hat{K}(t) = -t$$

$$\hat{K}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}$$

$$\hat{K}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t}$$

$$\hat{K}\left(\boldsymbol{R} \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t}\right) = -\boldsymbol{R} \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t}$$

所以，在时间反演下，$\boldsymbol{S}_i \to -\boldsymbol{S}_i$，$\boldsymbol{I}_a \to -\boldsymbol{I}_a$，使 Hamiltonian 保持不变，它本身构成一个群——时间反演群 ε_t.

上述的 6 类算子，本身组成一个群. 这 6 类算子与严格的 Hamiltonian 对易，整个 Hamiltonian 群是这 6 个群的乘积. 一般地，时间反演群在本征值、本征函数的分类时不起作用，只在讨论 John-Teller 效应时要予以考虑，故下面称之为 Hamiltonian 群的 G_{full} 群是上述 5 个群的直接乘积群，不包括时间反演群.

$$G_{\text{full}} = G_T \otimes G_R \otimes G^{(\text{ep})} \otimes G^{(\text{CNP})} \otimes I$$

下面讨论 Hamiltonian 群中 5 个子群的表示.

1° 平移群的表示

分子的定态 Shcrodinger 方程

$$H\Psi = E\Psi$$

通过坐标变换，可以分为质心运动和分子内部运动两部分，即

$$H = -\frac{1}{2M}\nabla^2_{CM} + H_{int}$$

其中 H_{int}是分子内部作用 Hamiltonian，本征函数可写为

$$\Psi = \Psi_{CM} \times \Psi_{int}$$

本征值为

$$E = E_{CM} + E_{int}$$

质心运动方程为

$$-\frac{1}{2M}\nabla^2_{CM}\Psi_{CM} = E_{CM}\Psi_{CM}$$

解得

$$\Psi_{CM} = e^{iK \cdot R}$$

和

$$E_{CM} = \frac{K^2}{2M}$$

其中，K 相当于动量. 平移算子作用于 Ψ_{CM}上.

$$\hat{P}\Psi_{CM} = e^{iK \cdot (R+A)} = e^{iK \cdot A}\Psi_{CM}$$

通常，平移群作用在质心上的影响不予考虑.

2° 旋转群的表示

分子转动本征方程为

$$\hat{J}^2\Psi(J, M) = J(J+1)\Psi(J, M)$$

$$\hat{J}_z\Psi(J, M) = M\Psi(J, M)$$

其中，J 为总动量量子数;J_z 为其在 z 方向的分量;$\Psi(J, M)$是球谐函数. 由于 J 和 J_z 均与 Hamiltonian 对易，其相应转动本征函数可以用不可约表示 J, M 来表示.

3° 电子置换群 S_n^{ep} 的表示

任何置换可表示成对换的乘积，第七章已讨论过了置换表示为对换的乘积的方法不是唯一的，但置换的奇偶性是唯一的.

按泡利原理，由于电子是费米子，自旋为 1/2，交换两个电子，电子态波函数只改变符号，因而电子态波函数所属电子置换群的不可约表示是确定的，为全反对称表示.

4° 全同核置换群 $G^{(CNP)}$ 的表示

形如 $A_aB_bC_c$ 的分子全同核置换群为

$$G^{(CNP)} = S_a^{(A)} \otimes S_b^{(B)} \otimes S_c^{(C)}$$

如为费米子，自旋为半整数，则

$$P_{ij} = -1$$

如为玻色子，自旋为整数，则

$$P_{ij} = 1$$

可见，核波函数所属全同核置换群 $G^{(CNP)}$ 的不可约表示也是确定的. 自旋为半整数和整数，分属 -1 和 1 的不可约表示.

5° 空间反演群 I

反演群 I 只含有 2 个元素

$$E,\quad I$$

其不可约表示见下表.

反演群 I 的不可约表示特征标表

I	E	I
Γ_1	1	1
Γ_2	1	-1

其中，属于 Γ_1 的状态波函数有正宇称，属于 Γ_2 的有负宇称.

8.1.2　全同核置换反演群 CNPI

在上节所讨论的分子 Hamiltonian 对称群

$$G_{\text{full}}=G_T\otimes G_R\otimes G^{(\text{ep})}\otimes G^{(\text{CNP})}\otimes I$$

中平移群 G_T 和转动群 G_R 与分子内部运动没有关系. 因而一般都不予讨论，而电子置换群 $G^{(\text{ep})}$ 与核运动无关，在讨论分子的振动和转动运动时，只须讨论群 $G^{(\text{CNP})}\otimes I$，称这个群为全同核置换反演群，记为 CNPI，这个群对研究分子光谱理论是十分重要的.

对于一定的分子 CNPI 群仅决定于分子构成，即分子式. 下面举例对分子的 CNPI 群进行说明.

1. H_2O 的 CNPI 群

H_2O 分子中含有 2 个全同的质子和 1 个氧原子，从分子式可以立即得到其 CNPI 群.

$$\begin{aligned}\text{CNPI}&=S_2\otimes I\\&=\{E,\ (12)\}\otimes\{E,\ I\}\\&=\{E,\ (12),\ I,\ I(12)\}\end{aligned}$$

此 CNPI 群共有 $2!\times2=4$ 个群元素. H_2O 分子的分子点群是从 H_2O 分子的构型得到的. H_2O 分子中含有一个 C_2 轴，2 个通过 C_2 轴的对称面，连同单位元素，构成总共 4 个元素的点群.

$$C_{2v}=\{E,\ C_2,\ \sigma_{xy},\ \sigma_{yz}\}$$

H_2O 分子的 CNPI 群和分子点群虽然都是 4 个元素，但二者是不同的，C_{2v} 群不能反映 Euler 角的变化，所以不能用来讨论 H_2O 分子的转动光谱，而只能讨论其振动光谱；而 CNPI 群可以反映 Euler 角的变化，既可用来讨论振动光谱，也可讨论转动光谱. 但这两个群是同构的，特征标表是一样的.

图 8.1.1 给出的是 H_2O 分子的 CNPI 群 4 个元素和 C_{2v} 群 4 个元素之间的关系，其中坐标原点在质心，1、2 为两个质子 H 的标号，箭头代表 H 核在平面内的移动方向，⊕、⊖ 代表电子的坐标. 从图 8.1.1 中可以看出，分子点群的元素 C_2、σ_{xy} 和 σ_{yz} 可以通过 CNPI 群的(12)，I 和 $I(12)$ 3 个元素分别绕 y 轴、z 轴和 x 轴转 180°角得到. 由此可见，用 CNPI 群得到的图像和用分子点群得到的图像是不同的，但它们之间可以通过绕二重轴的转动而互变，使两个群的元素一一对应，因此，这两个群是同构的.

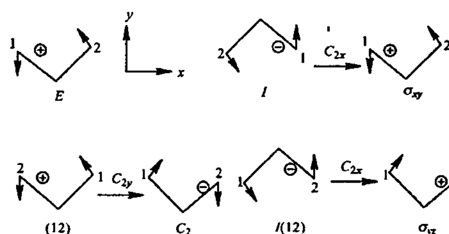


图 8.1.1 H_2O 分子的 CNPI 群和 C_{2v}群元素之间的关系

2. CH_3F 的 CNPI 群

CH_3F 的 CNPI 群为

$$\begin{aligned}\text{CNPI} &= S_3 \otimes I \\ &= \{E,(12),(23),(31),(123),(132)\} \otimes \{E, I\} \\ &= \{E,(123),(132),(12)^*,(23)^*,(31)^*,I, \\ &\quad (123)^*,(132)^*,(12),(23),(13)\}\end{aligned}$$

其中( )* = I( )，前6个元素组成CNPI群的一个子群，这个子群作用到CH_3F分子上，保持其左旋或右旋不变，如图8.1.2所示. 其中1, 2, 3, 为3个H核的标号，从图中可以看出，左边按1, 2, 3方向是右旋，右边为左旋，两个结构互为镜像，这两种结构不能通过空间转动得到，只能通过伞形振动或2, 3两个H核交换才能得到. 然而CH_3F分子不能通过这两种方式实现镜像互变，所以不需要CNPI群的全部元素来讨论它的光谱. 这相应于在CH_3F分子的势能面上有两个极小值，一个左旋结构，一个右旋结构，两个极小值之间势垒很大，不能互变，并且两个结构没有相互作用，能级简并，在光谱上测不出其光谱的分裂，因此只需用CNPI群中子群——MS群就可以来讨论CH_3F分子的光谱.

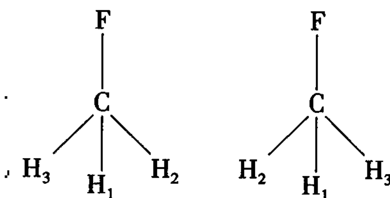


图 8.1.2 CH_3F 的左旋和右旋构型

CH_3F分子的这种不改变其左旋或右旋方式的MS群与分子点群$C_{3v} = \{E, C_3, C_3^2, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$是同构的.

若有伞形振动(即两个镜像构型能够互变，如NH_3、甲基CH_3等)，就须用CNPI群的全部来讨论光谱.

$$\begin{aligned}\text{CNPI} &= \text{MS} \otimes \{E, I\} \\ &\cong C_{3v} \otimes \{E, \sigma_h\} \\ &= D_{3h}\end{aligned}$$

此时CNPI群也称为MS群，它同构于D_{3h}群，所以在讨论NH_3或CH_3的光谱时要用D_{3h}而不能用C_{3v}.

这个例子说明CNPI群不一定等于MS群，CH_3F因为有两个等价构型，不能互变，其MS群是CNPI群的一个子群，其元素数目只是CNPI群的一半；而对NH_3分子，其两个等价构型能互变，就要用CNPI群的全部也称MS群来讨论其光谱. 所以选择MS群要

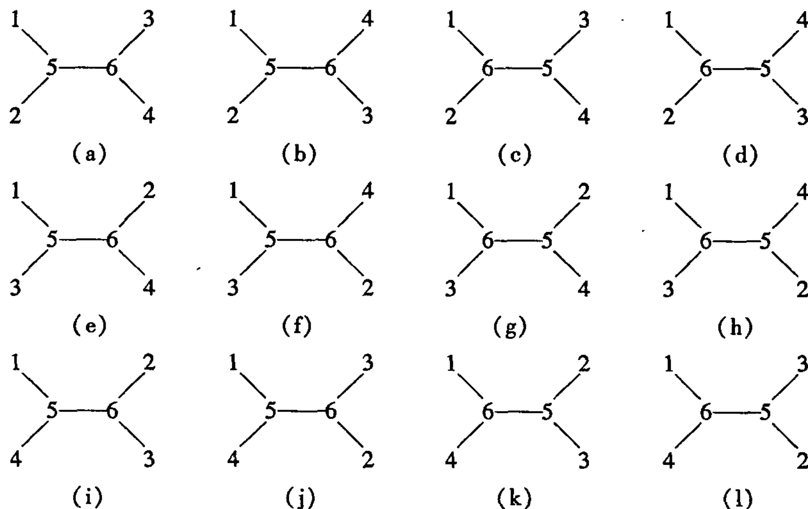
对具体的分子作具体的分析.

3. $H_2C{=}CH_2$ 的 CNPI 群

$H_2C{=}CH_2$ 分子中有 4 个等同 H 核，2 个等同 C 核

$$\text{CNPI} = S_4 \otimes S_2 \otimes I$$

CNPI 群含有 $4! \times 2! \times 2 = 96$ 个元素，有 12 个等价结构，如图8.1.3所示.



8.1.3　$H_2C{=}CH_2$ 的 12 个等价构型

图 8.1.3 中，1，2，3，4 为 4 个 H 核的标号;5，6 为 2 个 C 核的标号. 从图中可以看出，第 2 列是第 1 列通过内旋转得到的;第 3，4 两列是 1，2 两列中各元素对调 5，6 标号得到的. 这 12 个等价构型不能用空间转动得到，也不能通过对称中心的反演得到，因而在势能面上有 12 个极小值，很难互变，在光谱线上 12 条谱线不分裂，只有在高能量状态下，1，2 两列可以通过内旋转互变，3，4 两列也可以通过内旋转互变，这样 1，2 两列和 3，4 两列有相互作用.

分子 $H_2C{=}CH_2$ 还存在有内旋转和无内旋转的两种情况，这两种情况的分子对称群 MS 是不同的，下面说明它们.

1° 无内旋转

每个等价结构含有 96/12 = 8 个群元素.

$$\begin{aligned} \text{MS} &= \{E,\ (12)(34),\ (13)(24),\ (14)(23)\} \otimes \{E,\ I\} \\ &\cong C_{2v} \otimes \{E,\ \sigma_h\} = D_{2h} \end{aligned}$$

这样 MS 群是一个含有 8 个元素的群，同构于 D_{2h}，从图 8.1.4 可以看出，(12)(34)相当于绕 5，6 轴转 180°，(13)(24)(56)相当于绕平面内垂直于 5，6 的轴转 180°，(14)(23)(56)相当于绕垂直于平面和 5，6 轴转 180°.

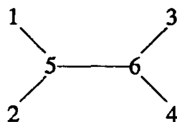


图 8.1.4　$H_2C{=}CH_2$ 分子

2° 内旋轴

此时要考虑(12), (34)这两个群元素

$$\mathrm{MS} = \{E, (12), (34), (12)(34), (13)(24)(56), (14)(23)(56), (1324)(56), (1423)(56)\} \otimes \{E, I\}$$

共有 16 个群元素，这样 $H_2C=CH_2$ 分子有内旋转或相互作用强时，就要用这 16 个元素的群来讨论其光谱了.

上面我们讲了 3 个例子，H_2O 分子只有一个平衡构型，MS 群等于 CNPI 群；CH_3F 有 2 个平衡构型，MS 群只用 CNPI 群中的一半元素，C_2H_4 有 12 个等价构型，MS 群只有 8 个元素，考虑内旋转时，须用 16 个元素的 MS 群来讨论.

8.2 CNPI 群与分子对称群

上一节讨论了 CNPI 群的理论基础，实际上，CNPI 群是 Hamiltonian 群的子群，Hamiltonian群由 6 个子群的直接乘积构成. CNPI 群包含了 Hamiltonian 群中CNP群和反演群这两个子群. 在这一节将要具体讨论 CNPI 群和分子对称群，即 MS 群. 其中 MS 群是 CNPI 群的一个子群. 对于一些分子，由于其特有的分子结构，可不用 CNPI 群，而用它的一个子群 MS 群就可进行讨论分子振动转动光谱，从而大大简化了处理过程. 本节将讨论如何利用具体分子的性质来选择 MS 群.

8.2.1 CNPI 群与分子点群

CNPI 群和分子点群本质上是不同的，其不同点主要有：

(1) CNPI 群用 $G^{(\mathrm{CNPI})}$ 来表示，分子点群用 G 来表示，$G^{(\mathrm{CNPI})}$ 与 Hamiltonian 交换，即

$$[G^{(\mathrm{CNPI})}, H] = 0$$

而 G 与 H 不交换

$$\begin{aligned}[G, H] &= [G, H^0 + H'] \\ &= [G, H^0] + [G, H'] \\ &= [G, H'] \neq 0\end{aligned}$$

其中

$$H^0 = H_{\mathrm{rot}} + H_{\mathrm{vib}} + H_{\mathrm{elec}} + H_{\mathrm{espin}} + H_{\mathrm{nspin}}$$

H'是 H 中的其它作用，可视为微扰. 分子点群可用来讨论振动光谱，它可以由分子的平衡结构确定，但是因为 G 与 H 不对易，有必要用 CNPI 群来讨论分子光谱.

(2) CNPI 群可用来讨论振转光谱，而分子点群只能用来讨论振动光谱，不能讨论转动光谱，其原因是 G 中的操作不反映 Euler 角的变化.

(3) CNPI 群由分子式确定，而分子点群由平衡结构确定. 这看起来 CNPI 群很简单，但其群元素太多，在具体应用时仍要考虑平衡结构. 例如

H_2	$2! \times 2 = 4$
H_2O	$2! \times 2 = 4$
BF_3	$3! \times 2 = 12$

CH_3F	$3!\times2=12$
CH_4	$4!\times2=48$
C_2H_4	$4!\times2!\times2=96$
SF_6	$6!\times2=1440$
C_2H_6	$6!\times2!\times2=2880$
C_2H_5OH	$6!\times2!\times2=2880$
C_6H_6	$6!\times6!\times2=1036800$

从上面几个例子可以看出，CNPI 群对于复杂分子，其群元素太多，实际上应用 CNPI 群来讨论分子光谱，不仅要考虑分子式，也要考虑平衡结构，结合具体的分子，利用其子群 MS 群来讨论.

8.2.2　等价平衡构型与 MS 群

1. 等价平衡构型

讨论分子光谱可用 MS 群的原因是因为分子有等价的平衡构型，通常，在势能面上有多个极小值，每个极小值代表一个平衡构型，讨论分子光谱实际上只须用 CNPI 群的子群 MS 群，因此等价平衡构型的概念很重要，因为它能帮助我们如何选取 MS 群.

1° CH_4 的 MS 解

CH_4 的势能面上有如图 8.2.1 所示的几种特殊构型.

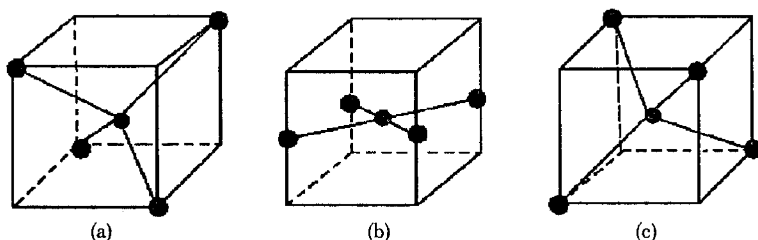


图 8.2.1　CH_4 在势能面上几个特殊构型

不难看出，若处于能量极小值的构型(a)中，当上面的两个 H 往下挪动，下面的两个 H 往上挪动，至同一个平面时，能量最高;继续挪动，至另一个能量极小值构型(c).(a)为一个极小值，(c)为另一个极小值，一个极小值至另一个极小值必须经过一个势垒.(a)和(c)为等价平衡构型，互为镜像结构，对 CH_4 而言，两个平衡结构之间不能互变，讨论 CH_4 的光谱时，只须用 CNPI 群一半群元素构成的 MS 群即可，CH_4 的 MS 群同构于 T_d 群.

光谱实验已经证明 CH_4 有相邻两条谱线离得很近的特点，每两条可看成一组，由于隧道效应使谱线有少许分裂，这说明 CH_4 分子存在两种等价平衡构型，如图 8.2.2 所示.

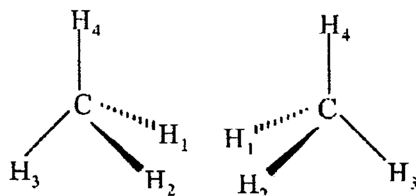


图 8.2.2　CH_4 分子的两个等价平衡构型

这两个等价的平衡构型互为镜像，用空间的旋转不能使它们互变.

MS 群只用 CNPI 群的一半元素，即 48/2 = 24 个元素，与 T_d 群同构，MS $\cong T_d$. MS 群的元素为：

	(123)		$(12)^*$	$(1234)^*$
	(132)	(12)(34)	$(13)^*$	$(1324)^*$
	(124)	(13)(24)	$(14)^*$	$(1423)^*$
E	(142)	(14)(23)	$(23)^*$	$(1243)^*$
	(134)		$(24)^*$	$(1342)^*$
	(143)		$(34)^*$	$(1432)^*$
	(234)			
	(243)			

2° C_2H_4 的 MS 解

C_2H_4 的 CNPI 群有 4! ×2! ×2 =96 个元素，在势能面上有如图 8. 1. 3 所示的 12 个等价平衡构型，图中 1，2，3，4 为 4 个 H 的标号；5，6 为 2 个 C 的标号；第 2 列为第 1 列的右端绕 5，6 轴转 180°；第 3 列为第 1 列交换 5，6 两个核的位置；第 4 列为第 2 列交换 5，6 两个核的位置. 这是没有内旋转时的等价平衡构型，实际上 C_2H_4 中的双键内旋转势垒较大，这 12 个等价平衡结构之间没有相互作用，此时 12 条谱线简并，只须用 96/12 = 8 个元素的 MS 群来讨论其光谱.

$$\begin{aligned} \text{MS} &= \{E, (12)(34), (13)(24)(56), (14)(23)(56)\} \otimes \{E, I\} \\ &\cong D_2 \otimes \{E, \sigma_h\} \\ &= D_{2h} \end{aligned}$$

若其有内旋转，则如图 8. 2. 3 所示，上述两个等价平衡结构之间有相互作用，12 个等价结构组成 6 对，MS 群的群元素个数为 96/6 = 16. 此时须考虑(12)，(34)这两个对称操作元素，使得 MS 群的元素个数由 8 增至 16.

$$\begin{aligned} \text{MS} = &\{E, (12), (34), (12)(34), (13)(24)(56), (1324)(56) \\ &(14)(23)(56), (1423)(56)\} \otimes \{E, I\} \\ = &C_2 \otimes C_2 \otimes C_2 \otimes C_i \end{aligned}$$

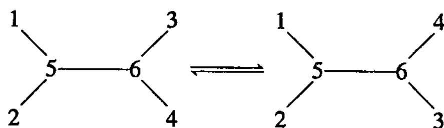


图 8. 2. 3 C_2H_4 内旋相互作用

2. CH_3F，NF_3，NH_3，BF_3，CH_3 和 HN_3 的 MS 群

下面所举的几个例子，都含有 3 个等同核，其 CNPI 群相同.

$$\begin{aligned} \text{CNPI} &= S_3 \otimes I \\ &= \{E, (12), (23), (31), (123), (132)\} \otimes \{E, I\} \end{aligned}$$

但 MS 群却因构型不同而异，其中

$$MS \subseteq CNPI$$

1° CH_3F

CH_3F 分子有两个镜像结构，不能互变，在势能面上有两个极小值，两个极小值之间的势垒较大，MS 群只须用 CNPI 群一半的元素，它同构于 C_{3v}，图 8.2.4 给出了这两种镜像结构的示意图.

$$MS = \{E, (123), (132), (23)^*, (31)^*, (12)^*\}$$
$$\cong \{E, C_3, C_3^2, \sigma_{1v}, \sigma_{2v}, \sigma_{3v}\} = C_{3v}$$

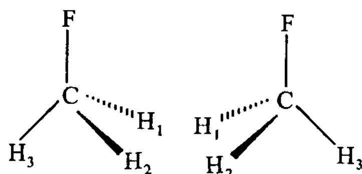


图 8.2.4　CH_3F 的两种镜像结构

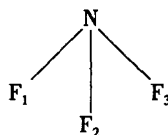


图 8.2.5　NF_3 的平衡结构

2° NF_3

NF_3 的 MS 群与 CH_3F 的相同，因为 NF 键能很强，两个等价平衡结构不能互变(图 8.2.5).

3° NH_3

NH_3 有伞形振动，左旋、右旋可以互变，在势能面上两个极小值之间的势垒只有 2000 cm^{-1}，其 MS 群和 CNPI 群相同，同构于 D_{3h}(图 8.2.6).

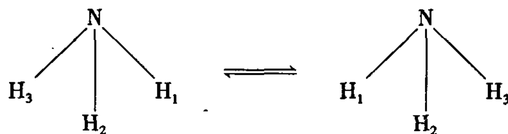


图 8.2.6　NH_3 的两种结构

4° BF_3

BF_3 为平面结构，3 个 F 和 B 在同一个平面上(图 8.2.7)，MS 群和 CNPI 群相同.

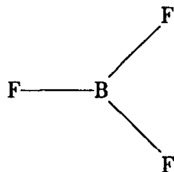


图 8.2.7　BF_3 分子结构

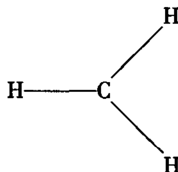


图 8.2.8　CH_3 分子结构

5° CH_3

CH_3 为平面结构(图 8.2.8)，同 BF_3，亦有 MS = CNPI

6° HN_3

HN_3 含有 $3! \times 2 = 12$ 个元素，有 6 个等价平衡构型，不能互变(图 8.2.9)，故 MS 群

的元素个数为 12/6 =2，

$$MS = \{E, I\}$$

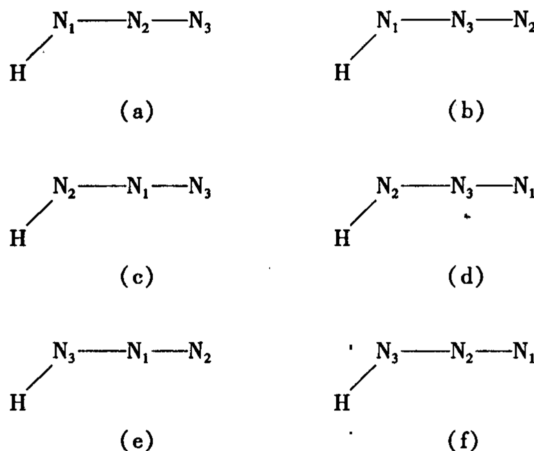


图 8.2.9 HN_3 分子结构

8.2.3 CNPI 和 MS 群的关系

设 CNPI 群为一个大群 G，$G=\{E, G_2, G_3, \cdots, G_g\}$，其不可约表示为 $\Gamma^{(\alpha)}$，相应的 MS 群为一个小数群 Q，$Q=\{E, Q_2, Q_3, \cdots, Q_q\}$，$Q\subset G$，若用群 G 的不可约表示 $\Gamma^{(\alpha)}$ 来组成群 Q 的表示 $\Gamma^{(\alpha)}(Q_r)$，$r=1, 2, \cdots, q$. $\Gamma^{(\alpha)}(Q_r)$ 一般是可约的. 下面讨论 $\Gamma^{(\alpha)}(Q_r)$ 是如何向 $\Gamma^{(\alpha)}$ 分解的.

1. CNPI 群的分解

$$\text{CNPI} = G = \{E, G_2, G_3, \cdots, G_g\}，g \text{ 个元素}$$

$$\text{MS} = Q = \{E, Q_2, Q_3, \cdots, Q_q\}，q \text{ 个元素}$$

$g/q=p$，p 代表有多少个等价平衡构型，即在势能面上有 p 个极小值，极小值之间有势垒. 亦即在势能面上有 p 个区域，$D_1, D_2, \cdots, D_p$. 从 D_1 区域的等价平衡结构得到了 D_1 区域的 MS 群 Q，则

$$QD_1 = D_1$$

在 G 中，总可以找到不属于 Q 的群元素 $K_2, K_3, \cdots, K_p$，作用于 D_1 上，有

$$K_2D_1 = D_2 \Rightarrow K_2QD_1 = D_2$$

$$K_3D_1 = D_3 \Rightarrow K_3QD_1 = D_3$$

$$\cdots\cdots$$

$$K_pD_1 = D_p \Rightarrow K_pQD_1 = D_p$$

即 G 中的元素可分成 p 类，第一类为 Q，第二类为 K_2Q，第三类为 K_3Q，…，第 p 类为 K_pQ. 可用反证法证明，不同类之间的元素是不同的.

假设 $K_2Q_r=K_3Q_s$，则将两边右侧同乘 Q_r^{-1}，得

$$K_2Q_rQ_r^{-1}=K_3Q_sQ_r^{-1}$$
$$K_2=K_3Q_sQ_r^{-1}$$

因为 $Q_sQ_r^{-1}$ 仍为 Q 的元素，有

$$K_2=K_3Q_t$$

则

$$K_2D_1=K_3Q_tD_1=D_3$$

即 K_2 作用于 D_1 上等于 D_3，与原先的定义不符，故

$$K_2Q_r\neq K_3Q_s$$

对于群 G，含有 p 个区，可以按左陪集向它的子群 Q 分解.

$$G=Q+K_2Q+\cdots+K_pQ$$

其中，$K_iQ(i=2, 3, \cdots, p)$为 Q 的左陪集.

由此，从 D_1 出发，总可找到 G 中的元素，作用于 D_1 上得到另外的区域. 临近的等价平等构型之间的性质是相似的，各区域间是可以通过 G 中的元素作用而变换.

2. 各个区域的 MS 群

由上面的讨论得知，若 D_1 的 MS 群为 Q，可以证明，D_2 区域上的 MS 群就是 $K_2QK_2^{-1}$，即由 Q 经过相似变换而得到.

1° 证明 $K_2QK_2^{-1}$ 组成一个群

(1) 存在单位元素：若 Q 中有单位元素 E，则 $K_2QK_2^{-1}$ 集合中亦有

$$K_2QK_2^{-1}=K_2K_2^{-1}=E$$

(2) 封闭性：因为

$$(K_2Q_rK_2^{-1})(K_2Q_sK_2^{-1})=K_2Q_rK_2^{-1}K_2Q_sK_2^{-1}=K_2Q_tK_2^{-1}$$

其中，$Q_t=Q_rQ_s$，满足封闭性.

(3) 结合律当然满足，因为 K 和 Q 都是 G 中的元素.

(4) 存在逆元素

$$(K_2Q_rK_2^{-1})^{-1}=K_2Q_r^{-1}K_2^{-1}$$

Q_r^{-1}仍为 Q 中的元素.

2° Q 与 $K_2Q_sK_2^{-1}$ 是同构的

$$Q=\{E, Q_2, Q_3, \cdots, Q_p\}$$
$$K_2QK_2^{-1}=\{E, K_2Q_2K_2^{-1}, K_2Q_3K_2^{-1}, \cdots, K_2Q_pK_2^{-1}\}$$

即 Q 与 $K_2QK_2^{-1}$ 两个群中的元素一一对应，并且 Q 中的两个元素相乘对应于 $K_2QK_2^{-1}$ 中两个对应元素相乘，如

$$Q_2Q_3\leftrightarrow(K_2Q_2K_2^{-1})(K_2Q_3K_2^{-1})=K_2(Q_2Q_3)K_2^{-1}$$

因此，Q 与 $K_2QK_2^{-1}$ 是同构的，并且

$$K_2QK_2^{-1}D_2=K_2QK_2^{-1}K_2D_1=K_2QD_1=D_2$$

因此，$K_2QK_2^{-1}$ 仍是 G 中的一个子群，作用在 D_2 上仍在 D_2 区，$K_2QK_2^{-1}$ 是 D_2 上的 MS 群.

这样，从 D_1 区的 MS 群 Q 出发，通过相似变换就可得到其它区域的 MS 群:

$$
\begin{array}{ll}
D_1 & Q \\
D_2 & K_2 Q K_2^{-1} \\
D_3 & K_3 Q K_3^{-1} \\
\vdots & \vdots \\
D_p & K_p Q K_p^{-1}
\end{array}
$$

例 1 CH_4 分子

$$\text{CNPI} = S_4 \otimes I, \quad g = 48$$

$$\text{MS} \cong T_d, \quad q = 24$$

$p = 48/24 = 2$，即有 2 个等价平衡结构，分 D_1，D_2 两个区域.

CNPI 群可向其子群 MS 群分解.

$$\text{CNPI} = T_d + (12) T_d$$

2 个区域的 MS 群分别为

$$D_1: \quad T_d$$

$$D_2: \quad (12) T_d (12)$$

例 2 $CH_2 = CH_2$ 分子

$$\text{CNPI} = G_{96} = S_4 \otimes S_2 \otimes I, \quad g = 96$$

$$\text{MS} = Q, \quad q = 8$$

$p = 96/8 = 12$，即有 12 个等价平衡结构，分 D_1，D_2，…，D_{12}，12 个区域.

$$G_{96} = Q + (34) Q + (56) Q + (56)(34) Q + \cdots$$

各个区域上的 MS 群为

$$
\begin{array}{ll}
D_1 & Q \\
D_2 & (34) Q (34)^{-1} \\
D_3 & (56) Q (56)^{-1} \\
D_4 & (56)(12) Q (12)(56) \\
\vdots & \vdots
\end{array}
$$

3. 基函数

D_1 的不可约表示为

$$|1, V_\nu\rangle$$

其中 1 代表第 1 区的标号；ν 为不可约表示标号；V 为不可约表示 ν 的基函数标号.

D_2 的不可约表示的基函数，可由 K_2 作用于 D_1 的基函数上得到

$$|2, V_\nu\rangle = K_2 |1, V_\nu\rangle$$

由此，p 区上的不可约表示基函数为

$$|p, V_\nu\rangle = K_p |1, V_\nu\rangle$$

它是由 K_p 作用于 D_1 的基函数上得到的.

因此，若已知一个区域上的不可约表示的基函数，另外区域的不可约表示基函数可

立即得到.

每个等价平衡构型都有不可约表示的基函数，这些基函数的集合组成了 CNPI 群的表示，单个区域的表示不能组成 CNPI 群的表示.

各个区域上不可约表示的基函数之间有如下的性质：

$$\langle m,\ u,\ \mu | l,\ \nu,\ v\rangle = \delta_{ml}\delta_{uv}\delta_{\mu v}$$

这表明，不同的区域、不同的不可约表示以及相同不可约表示不同的基函数之间积分为零.

$$\langle m,\ u,\ \mu | G_i | l,\ \nu,\ v\rangle = \langle l,\ u,\ \mu | K_m^{-1} G_i K_l | l,\ \nu,\ v\rangle$$

上式不等于零的必要条件为

$$K_m^{-1} G_i K_l \in Q$$

即 $K_m^{-1} G_i K_l$ 必在 D_1 区.

$$K_m^{-1} G_i K_l = Q_r,\ Q_r \in Q$$

所以，$G_i = K_m Q_r K_l^{-1}$，属于这种形式的 G_i 才使得

$$\langle m,\ u,\ \mu | G_i | l,\ \nu,\ v\rangle \neq 0$$

4. 相关性原理

如果 CH_4 有 D_1，D_2 两个区域，若两个区域无相互作用，则只会有一条谱线，若存在相互作用，谱线便分裂成 2 条(图 8. 2. 10).

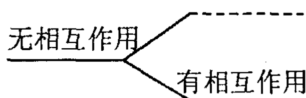


图 8. 2. 10　CH_4 分子的能量相关图

又如 C_2H_4，有 D_1，D_2，…，D_{12}，共 12 个区，若无作用时，只有一条谱线，此时按 MS 群的不可约表示来标志. 若能量高时，相互作用很强，谱线全部分裂，这 12 条谱线要用 CNPI 群的 96 个元素来分类，它们是如何向 MS 群分解的？这涉及到相关原理.

1° 相关原理

设有两个群，

大群：　$G = \text{CNPI} = \{E,\ G_2,\ G_3,\ \cdots,\ G_g\}$，　g 个元素

小群：　$G = \text{MS} = \{E,\ Q_2,\ Q_3,\ \cdots,\ Q_q\}$，　q 个元素

Q 为 G 的一个子群.

设 $\Gamma^{(\alpha)}(G)$ 为群 G 的不可约表示，

$$\Gamma^{(\alpha)}(G) = \{\Gamma^{(\alpha)}(E),\ \Gamma^{(\alpha)}(G_2),\ \Gamma^{(\alpha)}(G_3),\ \cdots,\ \Gamma^{(\alpha)}(G_g)\}$$

从大群 G 的不可约表示 $\Gamma^{(\alpha)}$，可以组成小群 Q 的表示 $\Gamma^{(\alpha)}(Q)$.

$$\Gamma^{(\alpha)}(Q) = \{\Gamma^{(\alpha)}(E),\ \Gamma^{(\alpha)}(Q_2),\ \Gamma^{(\alpha)}(Q_3),\ \cdots,\ \Gamma^{(\alpha)}(Q_q)\}$$

$\Gamma^{(\alpha)}(Q)$ 一般是可约的. 假定 $\Gamma^{(\alpha)}(Q)$ 是可约的，$\psi^{(\nu_1)}$，$\psi^{(\nu_2)}$ 为群 Q 的不可约表示，$\Gamma^{(\alpha)}(Q)$ 可以写成小群 Q 不可约表示的组合.

$$\Gamma^{(\alpha)}(Q) = \sum_{\nu} n_{\alpha\nu}\psi^{(\nu)}(Q)$$

其中，$n_{\alpha\nu}$为$\psi^{(\nu)}(Q)$出现的次数.

从群的特征标表，立即可得$n_{\alpha\nu}$的表示式：

$$n_{\alpha\nu} = \frac{1}{q}\sum_r \chi^{(\alpha)}(Q_r)\psi^{(\nu)}(Q_r^{-1})$$

其中，q为群Q的阶数；$\chi^{(\alpha)}(Q_r)$为Q_r在$\Gamma^{(\alpha)}$中的特征标；$\psi^{(\nu)}(Q_r^{-1})$为Q_r^{-1}在$\psi^{(\nu)}$中不可约表示的特征标；求和遍及群Q中所有的元素.

p个区域的基函数

$$\begin{array}{ll} D_1 & |1,\ V_\nu\rangle \\ D_2 & |2,\ V_\nu\rangle \\ D_3 & |3,\ V_\nu\rangle \\ \vdots & \vdots \\ D_p & |p,\ V_\nu\rangle \end{array}$$

若ν是一维的，就有p个基函数；若ν是二维的，就有$2p$个基函数. 当ν固定，这些基函数的集合组成CNPI($=G$)群表示的基函数，它们也可以分解为

$$\begin{aligned} m_{\alpha\nu} &= \frac{1}{g}\sum_i\sum_l\sum_v \langle l,\ \nu,\ v \mid G_i \mid l,\ \nu,\ v\rangle \cdot \chi^{(\alpha)}(G_i^{-1}) \\ &= \frac{1}{g}\sum_r\sum_l\sum_v \langle l,\ \nu,\ v \mid K_l Q_r K_l^{-1} \mid l,\ \nu,\ v\rangle \cdot \chi^{(\alpha)}(K_l Q_r^{-1} K_l^{-1}) \\ &= \frac{1}{g}\sum_r\sum_l\sum_v \langle l,\ \nu,\ v \mid Q_r \mid l,\ \nu,\ v\rangle \cdot \chi^{(\alpha)}(Q_r^{-1}) \\ &= \frac{p}{g}\sum_r \psi^{(v)}(Q_r)\chi^{(\alpha)}(Q_r^{-1}) \\ &= \frac{1}{q}\sum_r \chi^{(\alpha)}((Q_r)\psi^{(v)}(Q_r^{-1})) = n_{\alpha\nu} \end{aligned}$$

这就是相关原理$m_{\alpha\nu} = n_{\alpha\nu}$. 因此

$$\Phi^{(v)}(G) = \sum_\alpha n_{\alpha\nu}\Gamma^{(\alpha)}(G)$$

这里是说，小群Q的不可约表示扩充到大群的不可约表示后，它可按大群的不可约表示来分解.

5. 相关表

下面讨论大群G和小群Q的对称操作的相关表.

例　用XY_3分子来说明D_{3h}和C_{2v}群的相关表.

$$\text{CNPI} = S_3 \otimes I \cong D_{3h}$$

由于XY_3存在John-Teller效应，3个XY成为二长一短，D_{3h}降至C_{2v}. 所以，由于John-Teller效应，键长发生变化，出现了3个区域，D_1，D_2和D_3，这3个区域若无相互作用，3条谱线简并，MS群同构于C_{2v}，若相互作用很强，3条谱线分裂，就要用D_{3h}来分类，D_{3h}和C_{2v}对称操作对应关系如下：

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
C_{2v}	E		C_2^z	σ_{yz}		σ_{xz}

由此可得到相关表 8.2.1.

8.2.1　相关表

D_{3h}类型	C_{2v}类型	C_{2v}能级	D_{3h}子能级
A_1'	A_1	A_1	$A_1'+E'$
A_1''	A_2	A_2	$A_1''+E''$
A_2'	B_2	B_1	$A_2''+E''$
A_2''	B_1	B_2	$A_2'+E'$
E'	A_1+B_2		
E''	A_2+B_1		

D_{3h}有 4 个一维的，2 个二维的共 6 个表示，而 C_{2v}有 4 个一维的表示.

大群 D_{3h}的 E'向小群 C_{2v}分解成 A_1+B_2.

大群 D_{3h}的 E''向小群 C_{2v}分解成 A_2+B_1.

小群 C_{2v}的 A_1 向大群 D_{3h}分解成 $A_1'+E'$.

小群 C_{2v}的 A_2 向大群 D_{3h}分解成 $A_1''+E''$.

小群 C_{2v}的 B_1 向大群 D_{3h}分解成 $A_2''+E''$.

小群 C_{2v}的 B_2 向大群 D_{3h}分解成 $A_2'+E'$.

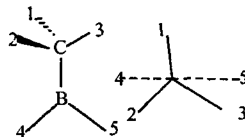
从表 8.2.1 可以看出，C_{2v}中每个一维的表示有 3 个简并的表示，分解到大群中是 1 个一维的和 1 个二维的表示，即分裂成 3 条谱线.

8.3　CNPI 群和 MS 群对非刚性分子光谱的应用

非刚性分子精确的 Hamiltonian 可按 8.1 节中所述表示出来，近似的 Hamiltonian，则要视具体的非刚性分子而不同. 20 世纪 60 年代以来，有很多关于非刚性分子光谱应用的例子，本节讨论 3 个非刚性分子的例子.

8.3.1　CH_3BF_2 分子及其光谱

CH_3BF_2 分子中含有 1 个 C—B 键，3 个等同的 H 和 2 个等同的 F，上面的 3 个 H 和下面的 2 个 F 可以内旋转，属于非刚性分子，CH_3BF_2 的结构如图 8.3.1 所示，其中 1，2，3 是 3 个 H 的标号，4，5 是 2 个 F 的标号.



8.3.1　CH_3BF_2 的结构

1. MS 群

首先，从分子式立即可以得到 CH_3BF_2 分子的 CNPI 群

$$\text{CNPI} = S_3 \otimes S_2 \otimes I$$

其 CNPI 群含有 $3!\times2!\times2=24$ 个群元素. 而 CH_3BF_2 的 MS 群只有 12 个群元素，这是因为 CH_3 是一个陀螺，要么是左旋，要么是右旋，右旋不能变成左旋，所以有两个区域 D_1 和 D_2，只能有 12 个元素.

$$\text{MS} = \{E, (123), (132), (12)^*, (23)^*, (31)^*; (45), (123)(45), (132)(45), (12)(45)^*, (23)(45)^*, (31)(45)^*\}$$

其实，CH_3BF_2 的 MS 群可以看作是前面的 6 个元素$\{E, (123), (132), (12)^*, (23)^*, (31)^*\}$乘上$\{E, (45)\}$这 2 个元素得到的，这 12 个 MS 群的元素可以用图 8.3.2 表示.

从图 8.3.2 可以看出，(123)相当于 E(不动)绕 C—B 轴逆时针转 240°，仍为右旋；(132)实际上是(123)的逆元素，相当于绕 C—B 轴转了 120°，两个 F 位置不变；第 2 列是相对于第 1 列 4，5 对调一下，第 3 列是在第 2 列上加一个反演，从图中可以看出，C—B 轴虽然反向了，但 3 个 H 仍为右旋不变；第 4 列是相对于第 3 列 4，5 对调一下.

CH_3BF_2 这个分子，用分子点群研究，好像是 C_{3v}，但没有 3 重轴，也没有 2 重轴，因此不能用分子点群，只能用分子对称群来研究其光谱.

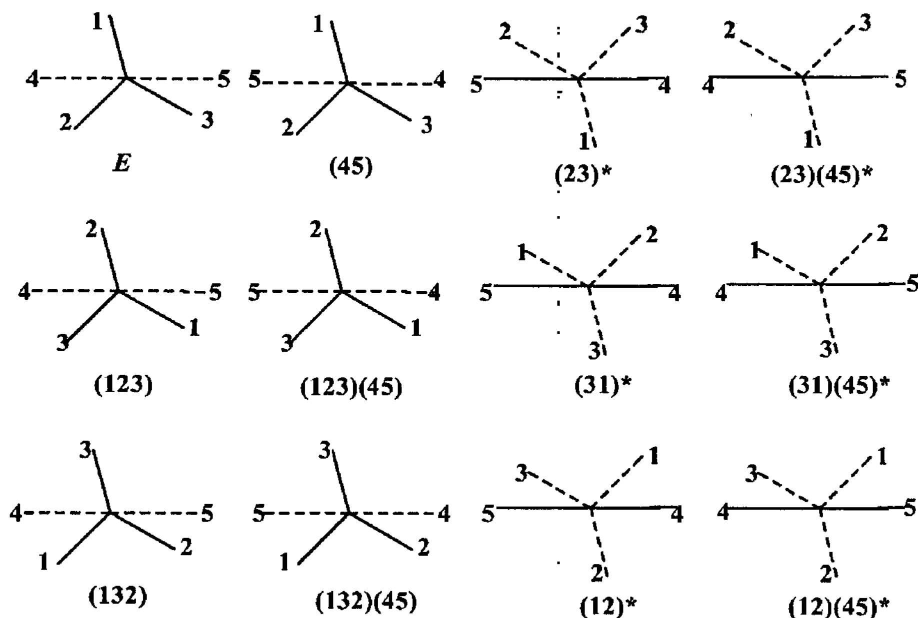


图 8.3.2 CH_3BF_2 分子 MS 群元素

2. 特征标表

群论应用于光谱，主要是利用群的特征标表，若要构造出 CH_3BF_2 分子 MS 群的特征标表，可利用 CH_3BF_2 分子的 MS 群同构于 D_{3h}，$\text{MS}\cong D_{3h}$，而 D_{3h} 的特征标表可以在通常群论的书中查到，直接得到 MS 群的特征标表. 表 8.3.1 是 CH_3BF_2 分子 MS 群的特征标表.

8.3.1　CH_3BF_2 分子 MS 群的特征标

	E	(123) (132)	(23)* (31)* (12)*	(45)	(123)(45) (132)(45)	(23)(45)* (31)(45)* (12)(45)*
A_1'	1	1	1	1	1	1
A_2'	1	1	-1	1	1	-1
E'	2	-1	0	2	-1	0
A_1''	1	1	1	-1	-1	-1
A_2''	1	1	-1	-1	-1	1
E''	2	-1	0	-2	1	0

3. 核自旋

对于振动或转动，都要涉及到核自旋. 就质子而言，核自旋为 1/2，两个质子交换其波函数要改变符号，对于^{19}F 而言，自旋也是 1/2，2 个^{19}F 交换也要改变相应波函数符号. 由于核自旋的要求，只能利用 2 个 H 或 F 交换改变符号的不可约表示，所以对整个波函数只能用 A_1'' 和 A_2'' 这两个不可约表示.

在 CH_3BF_2 分子中，3 个质子 H 的自旋有 8 个波函数，8 个波函数可以分解成

$$m = 3/2, \quad A_1'$$
$$m = 1/2, \quad A_1' + E'$$
$$m = -1/2, \quad A_1' + E'$$
$$m = -3/2, \quad A_1'$$

对于 2 个 F 的自旋，有 3 个波函数，它们分解成

$$m = 1, \quad A_1'$$
$$m = 0, \quad A_1' + A_1''$$
$$m = -1, \quad A_1'$$

表 8.3.2 给出了 H 和 F 自旋波函数的分解.

表 8.3.2　CH_3BF_2 的 H 和 F 自旋波函数的分解

	E	(123)	(23)*	(45)	(123)(45)	(23)(45)*	
$\alpha_1\alpha_2\alpha_3$	1	1	1	1	1	1	A_1'
$\alpha_1\alpha_2\beta_3$, $\alpha_1\beta_2\alpha_3$, $\beta_1\alpha_2\alpha_3$	3	0	1	3	0	1	$A_1' + E_1'$
$\alpha_1\beta_2\beta_3$, $\beta_1\alpha_2\beta_3$, $\beta_1\beta_2\alpha_3$	3	0	1	3	0	1	$A_1' + E_1'$
$\beta_1\beta_2\beta_3$	1	1	1	1	1	1	A_1'
$\alpha_4\alpha_5$	1	1	1	1	1	1	A_1'
$\alpha_4\beta_5$, $\beta_4\alpha_5$	2	2	2	0	0	0	$A_1' + A_1''$
$\beta_4\beta_5$	1	1	1	1	1	1	A_1'

4. 转动

转动要涉及到 Euler 角的问题，首先讨论一些有关的 Euler 角的内容.

1° Euler 角

考虑两组坐标系，一组是固定在空间的，质心在原点的 $OXYZ$ 坐标，另一组是固定在分子内的坐标 $Oxyz$. 这两组坐标的关系，可由 3 个 Euler 角的转动来表示：首先，绕 OZ 轴转动 φ 角；然后，绕 Oy' 轴转动 θ 角；最后，绕 Oz 轴转动 χ 角. 如此，经过 3 次转动，从固定在空间的坐标 $OXYZ$ 转化为固定在分子内的坐标 $Oxyz$，如图 8.3.3 所示.

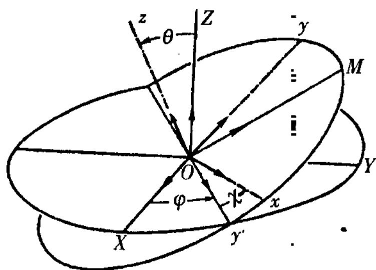


图 8.3.3 Euler 角

一个固定的矢量，在两个坐标系中有 2 组分向量 $\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$，它们之间的关系可用

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\chi & -\sin\chi & 0 \\ \sin\chi & \cos\chi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (8.3.1)$$

表示，亦可用表 8.3.3 表示.

表 8.3.3 质心和分子坐标系坐标向量间的变换关系

	X	Y	Z
x	$\cos\theta\cos\varphi\cos\chi - \sin\varphi\sin\chi$	$\cos\theta\sin\varphi\cos\chi + \cos\varphi\sin\chi$	$-\sin\theta\cos\chi$
y	$-\cos\theta\cos\varphi\cos\chi - \sin\varphi\cos\chi$	$-\cos\theta\sin\varphi\sin\chi + \cos\varphi\cos\chi$	$\sin\theta\sin\chi$
z	$\sin\theta\sin\varphi$	$\sin\theta\sin\varphi$	$\cos\theta$

Euler 角 θ, φ, χ 的函数 $f(\theta, \varphi, \chi)$ 随转动的变化可用下式表示：

$$\begin{cases} C_{2x}f(\theta, \varphi, \chi) = f(\pi - \theta, \pi + \varphi, -\chi) & (\text{绕 } Ox \text{ 转 } \pi \text{ 角}) \\ C_{2y}f(\theta, \varphi, \chi) = f(\pi - \theta, \pi + \varphi, \pi - \chi) & (\text{绕 } Oy \text{ 转 } \pi \text{ 角}) \\ C_{2z}f(\theta, \varphi, \chi) = f(\theta, \varphi, \pi + \chi) & (\text{绕 } Ox \text{ 转 } \pi \text{ 角}) \end{cases} \quad (8.3.2)$$

2° 转动基函数

对称陀螺转动的严格解，可以按下列基函数展开.

$$D^J_{MK}(\theta, \varphi, \chi)$$

其中

$$J = 0, 1, 2, \cdots,$$

$$M = -J, \cdots, J$$
$$K = -K, -K+1, \cdots, K$$

这里，J 为轨道的总角动量的量子数，M 为 J 在固定空间坐标 Oz 方向的分向量的量子数，K 为 J 在固定在分子内坐标 Oz 方向的分向量的量子数，对称陀螺轴就选在 Oz 方向，并且 $D^J_{MK}(\theta, \varphi, \chi)$ 可以按 θ, φ, χ 的函数乘积来表示.

$$D^J_{MK}(\theta, \varphi, \chi) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}M\varphi} d^J_{MK}(\theta) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}K\chi} \tag{8.3.3}$$

在转动操作下可表示为

$$\begin{aligned}
C_{2x} D^J_{MK}(\theta, \varphi, \chi) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}M(\pi+\varphi)} d^J_{MK}(\pi - \theta) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}K(-\chi)} \\
&= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}M\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}M\varphi} (-1)^{J-M} d^J_{MK}(\theta) \mathrm{e}^{\mathrm{i}K\chi} \\
&= (-1)^J D^J_{M\bar{K}}(\theta, \varphi, \chi) \\
C_{2y} D^J_{MK}(\theta, \varphi, \chi) &= (-1)^{J+K} D^J_{M\bar{K}}(\theta, \varphi, \chi) \\
C_{2z} D^J_{MK}(\theta, \varphi, \chi) &= (-1)^K D^J_{MK}(\theta, \varphi, \chi)
\end{aligned}$$

当 $K=0$ 时，

$$D^J_{M0}(\theta, \varphi, \chi)$$

当 $K\neq 0$ 时，

$$\begin{cases} D^J_{MK}(\theta, \varphi, \chi) \\ D^J_{M\bar{K}}(\theta, \varphi, \chi) \end{cases} \quad \text{简并度为 2}$$

CH_3BF_2 分子不是一个严格的对称陀螺分子，但可把 CH_3 看作一个整体，近似地看作是对称陀螺分子. 图 8.3.4 是把 CH_3BF_2 近似地视为对称陀螺分子的结构图和坐标取向，表 8.3.4 给出了对称元素和等价转动.

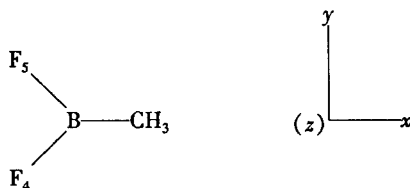


图 8.3.4　CH_3BF_2 近似视为对称陀螺分子的结构和坐标取向

表 8.3.4　对称元素和等价转动

对称元素	E	(123)	(23)*	(45)	(123)(45)	(23)(45)*
等价转动	E	E	C_{2z}	C_{2x}	C_{2x}	C_{2y}

对称陀螺的波函数为 $|J, \pm K, M\rangle$，以它为基的可约表示为表 8.3.5.

表 8.3.5　以对称陀螺波函数为基的可约表示

	E	C_{2x}	C_{2y}	C_{2z}
$K=0$	1	$(-1)^J$	$(-1)^J$	1
$K>0$	2	0	0	$2(-1)^K$

从上表可以看出，按不可约表示分类如表 8.3.6.

表 8.3.6 以对称陀螺波函数为基的不可约表示

	J(偶)	J(奇)
$K=0$	A_1'	A_1''
$K>0$	$A_1'+A_1''$	$A_2'+A_2''$

5. 统计权重

假定振动态在基态，质子自旋、F 自旋和转动三者的直积必须包含 A_1'' 或 A_2''，才能满足波函数整体的要求.

$$({}^4A_1',\ {}^2E')\otimes({}^3A_1',\ {}^1A_2')\otimes(A_1',\ A_1'',\ A_2',\ A_2'')\supset(A_1''\text{ 或 }A_2'')$$

这样可以得到 A_1', A_1'' 和 A_2'' 的权重分别为 4, 12, 4 和 12, 即 $A_1'(4)$, $A_1''(12)$, $A_2'(4)$和 $A_2''(12)$. 统计权重反映出转动光谱的强度，也代表有多少种方式得到此种不可约表示.

6. 内旋转

CH_3BF_2 分子的转动包括两种形式，一种是空间的整个分子的转动，另一种是 CH_3 内部的旋转，称为内旋转. 定义 τ 为 1 与 4 的夹角. 12 个群元素与 τ 对应关系见表 8.3.7.

表 8.3.7 12 个群元素与 τ 的对应关系

E τ	(45) $\tau+\pi$	$(23)^*$ $-\tau$	$(23)(45)^*$ $-\tau+\pi$
(123) $\tau+\frac{2\pi}{3}$	$(123)(45)$ $\tau-\frac{\pi}{3}$	$(31)^*$ $-\tau-\frac{2\pi}{3}$	$(31)(35)^*$ $-\tau+\frac{\pi}{3}$
(132) $\tau-\frac{2\pi}{3}$	$(132)(45)$ $\tau+\frac{\pi}{3}$	$(12)^*$ $-\tau+\frac{2\pi}{3}$	$(12)(45)^*$ $-\tau-\frac{\pi}{3}$

若选择内旋的基函数

$$e^{im\tau},\quad e^{-im\tau}$$

分别作用之，可得内旋转的特征标，如表 8.3.8.

表 8.3.8 CH_3BF_2 分子内旋转的特征标

m 值	E	(123)	$(23)^*$	(45)	$(123)(45)$	$(23)(45)^*$	
0	1	1	1	1	1	1	A_1'
1	2	-1	0	-2	1	0	E''
2	2	-1	0	2	-1	0	E'
3	2	2	0	-2	-2	0	$A_1''+A_2''$
4	2	-1	0	2	-1	0	E'
5	2	-1	0	-2	1	0	E''
6	2	2	0	2	2	0	$A_1'+A_2'$

质子自旋中出现的不可约表示 E'对转动权重无关，而内旋中出现有 E'与权重有关.

7. 选择定则

讨论偶极矩的选择定则，可有两种方式，一种是选择空间坐标系，即实验室坐标系，另一种是分子内坐标系.

1° 实验室坐标系下的选择定则

$\hat{P}$ 为置换算子，$\boldsymbol{\mu}$ 为分子偶极矩，$\boldsymbol{\mu}$ 有如下性质：

（1）$\hat{P}\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}$，即置换不改变偶极矩；

（2）$\hat{P}\boldsymbol{\mu}=-\boldsymbol{\mu}$，即置换反演使 $\boldsymbol{\mu}$ 方向发生变化，由此可见，依照特征标表，$\boldsymbol{\mu}\in A_2'$ [即 $\boldsymbol{\mu}(\mu_x,\mu_y,\mu_z)\in A_2'$]，所以偶极矩选择定则为，$A_1'\leftrightarrow A_2''$，这是考虑了核自旋的偶极矩选择定则. 若把核自旋包括在内，能级间只有 A_1'' 与 A_2'' 两种态之间的跃迁是允许的. A_1'' 与 A_2'' 的乘积的不可约表示一定包括 $\boldsymbol{\mu}$ 的不可约表示 A_2'，积分才不为零，跃迁才能允许.

但若核自旋无影响，则有选择定则

$$A_1'\leftrightarrow A_2',\ A_1''\leftrightarrow A_2'',\ E'\leftrightarrow E',\ E''\leftrightarrow E''$$

这四种跃迁都是允许的，它们之间两两相乘都包括了 A_2'.

2° 分子内坐标系下的选择定则

分子内部的偶极矩可以分解为在分子坐标轴的 3 个方向的分向量. 若整个分子在转动，分子内坐标亦跟着在转动，而偶极矩在 3 个方向上的分量是保持不变的. 得到了偶极矩在 3 个方向上分量的不可约表示，就可得到选择定则. 表 8.3.9 给出了偶极矩在 3 个方向上分量的不可约表示.

表 8.3.9　偶极矩在 3 个方向上分量的不可约表示

对称元素	E	(123)	(23)*	(45)	(123)(45)	(23)(45)*	
C_{2v}群的相应元素	E	E	σ_{xy}	C_{2x}	C_{2x}	σ_{xz}	
对 M_x 分量的作用	1	1	1	1	1	1	A_1'
对 M_y 分量的作用	1	1	1	−1	−1	−1	A_1''
对 M_z 分量的作用	1	1	−1	−1	−1	1	A_2''

从而得到选择定则：

M_x 的选择定则：$A_1'\leftrightarrow A_1'$，$A_2'\leftrightarrow A_2'$，$E'\leftrightarrow E'$，等；

M_y 的选择定则：$A_1'\leftrightarrow A_1''$，$A_2'\leftrightarrow A_2''$，$E'\leftrightarrow E''$；

M_z 的选择定则：$A_1''\leftrightarrow A_1''$，$A_2''\leftrightarrow A_2''$，$E''\leftrightarrow E''$.

讨论 CH_3BF_2 的分子光谱，就可以用以上的选择定则进行分析.

8.3.2　CH_3—CH_3 分子及其光谱

1. CNPI 群和 MS 群

$$\text{CNPI}=S_6\otimes S_2\otimes I$$

共有群元素个数 $6!\times2!\times2=2880$. 若用分子对称群 MS 群，只须 36 个元素，MS⊂CNPI，故 CH_3—CH_3 分子含有 2880/36 = 80 个等价构型. 图 8.3.5 是 CH_3—CH_3 的构型，a，b 为 C—C 键.

在 1963 年 Longuet-Higgina 工作出现之前，对 CH_3—CH_3 的讨论都没有找到适用的群，而 Longuet-Higgina 则利用了 MS 群的 2 个子群，并且这 2 个子群是互相对易的.

第一个子群的对称操作如下：

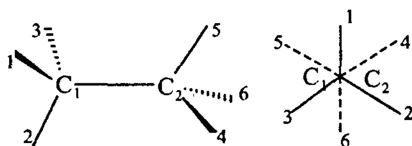


图 8.3.5 CH_3—CH_3 的构型

E: (123)(456), (132)(456);

(14)(25)(36)(ab), (15)(26)(34)(ab), (16)(24)(35)(ab).

这个子群的特点是 2 个 CH_3 绕着 C—C 三重轴的转动是同步的，而(14)(25)(36)(ab)，(15)(26)(34)(ab)和(16)(24)(35)(ab)3 个元素实际上代表的是转动.

第二个子群的对称操作如下：

E: (123)(456), (132)(456);

(14)(26)(35)(ab)*, (15)(24)(36)(ab)*, (16)(25)(34)(ab)*;

其中(123)(456)和(132)(465)代表的是 2 个 CH_3 陀螺绕着相反的方向转动，而(14)(26)(35)(ab)*，(15)(24)(36)(ab)*和(16)(25)(34)(ab)*并不代表转动，而是内旋转.

2. 特征标表

CH_3—CH_3 的 MS 群的第一个子群的特征标表见表 8.3.10，第二个子群的特征标表见表 8.3.11.

表 8.3.10 CH_3—CH_3 的 MS 群的第一个子群的特征标表

	E	(123)(465)	(14)(25)(36)(ab)
A_1(i)	1	1	1
A_2(i)	1	1	-1
E(i)	2	-1	0

表 8.3.11 CH_3—CH_3 的 MS 群的第二个子群的特征标表

	E	(123)(465)	(14)(26)(35)(ab)*
A_1(ii)	1	1	1
A_2(ii)	1	1	-1
E(ii)	2	-1	0

整个分子对称群 MS 的特征标表就是上面 2 个子群特征标表的乘积，见表 8.3.12.

表 8.3.12 CH_3—CH_3 分子的 MS 群不可约表示

	A_1(i)	A_2(i)	E(i)
A_1(ii)	A_1	A_2	E_1
A_2(ii)	A_3	A_4	E_2
E(ii)	E_3	E_4	G

这样得到 4 个一维的、4 个二维的和 1 个四维的共 9 个不可约表示，列于表 8.3.13 中.

表 8.3.13　CH_3—CH_3 分子的 MS 群特征标表

G	E_4	E_3	E_2	E_1	A_4	A_3	A_2	A_1	
4	2	2	2	2	1	1	1	1	1E
−2	−1	−1	2	2	1	1	1	1	2(123)(456)
0	0	0	−2	2	−1	−1	1	1	3(14)(26)(35)(ab)*
−2	2	2	−1	−1	1	1	1	1	2(123)(465)
1	−1	−1	−1	−1	1	1	1	1	4(123)
0	0	0	1	−1	−1	−1	1	1	6(142635)(ab)*
0	−2	2	0	0	−1	1	−1	1	3(14)(25)(36)(ab)
0	1	−1	0	0	−1	1	−1	1	6(142536)(ab)
0	0	0	0	0	1	−1	−1	1	9(12)(45)*

3. 内旋转

转动与内旋转的基函数为

$$\begin{aligned}&\Theta_{JKM}(\theta)e^{iM\varphi}e^{iK_a\chi_a}e^{iK_b\chi_b}\\&=\Theta_{JKM}(\theta)e^{iM\varphi}\cdot\exp\left[\frac{1}{2}i(K_a+K_b)(\chi_a+\chi_b)\right]\\&\quad\cdot\exp\left[\frac{1}{2}i(K_a-K_b)(\chi_a-\chi_b)\right]\end{aligned}\tag{8.3.4}$$

其中(θ, φ, χ_a)和(θ, φ, χ_b)为两个 CH_3 的 Euler 角，子群(i)中的群元素保持$\chi_a-\chi_b$ 不变. 内旋转分为两类(表 8.3.14)，一类与 J, K 有关;另一类与 L 有关，由此可以得到按不可约表示的分类. 式中 K 和 L 定义为

$$K=K_a+K_b,\quad L=K_a-K_b$$

表 8.3.14　CH_3—CH_3 分子的内旋转分类

K 值 转动类型	0 A_1(J 为偶数) A_2(J 为奇数)	1 E_1	2 E_1	3 A_1+A_2	4 E_1	5 E_1	6 A_1+A_2
L 值 扭动类型	0 A_1	1 E_3	2 E_3	3 A_1+A_3	4 E_3	5 E_3	6 A_1+A_3

8.3.3　N_2H_4 分子及其光谱

1. CNPI 群和 MS 群

N_2H_4 的 CNPI 群为

$$\mathrm{CNPI}=S_4\otimes S_2\otimes I$$

共有 4! ×2! ×2 =96 个元素. 而其中 MS⊂CNPI，只含有 16 个元素，有 96/16 =6 个等价构型. 图 8.3.6 所列出的是 N_2H_4 分子 MS 群的 16 个元素.

从图 8.3.6 可以看出，第 1 列的(12)，(34)和(12)(34)为内旋转，第 2 列为第 1 列元素绕 N—N 轴转动 180°，第 3、第 4 列分别是 1，2 两列的反演.

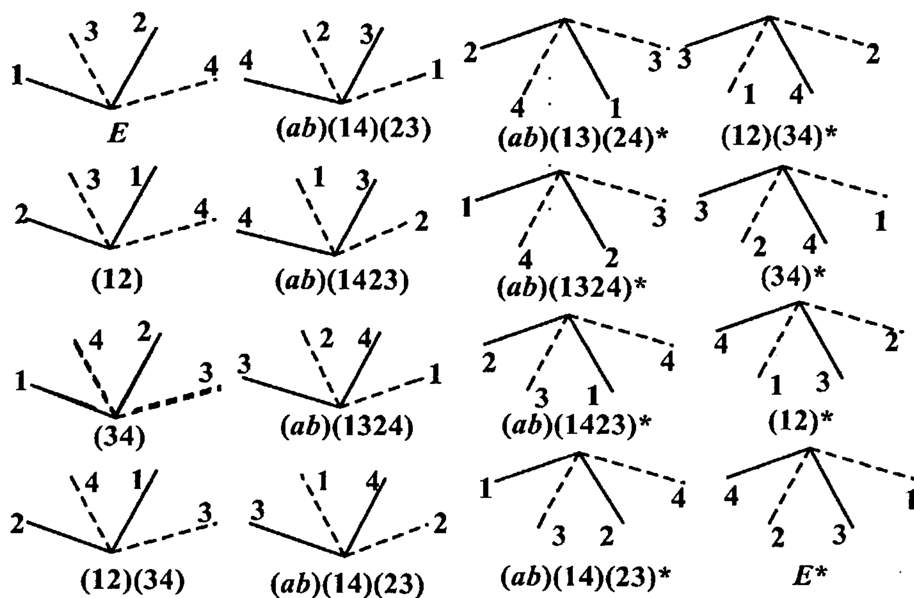


图 8.3.6 N_2H_4 分子 MS 群的 16 个元素

2. 特征标表

由于 MS$\cong D_{4h}$，从图 8.3.6 可以看出，前两列的 8 个元素所组成的群同构于 D_4，乘上反演 I 后的全部 16 个元素所组成的群同构于 D_{4h}，表 8.3.15 给出了 N_2H_4 分子 MS 群的特征标表.

表 8.3.15 N_2H_4 分子 MS 群的特征标表

E^-	B_2^-	B_1^-	A_2^-	A_1^-	E^+	B_2^+	B_1^+	A_2^+	A_1^+	
2	1	1	1	1	2	1	1	1	1	E
0	−1	1	−1	1	0	−1	1	−1	1	(12)(34)
0	1	−1	−1	1	0	1	−1	−1	1	{(ab)(13)(24), (ab)(14)(23)}
0	−1	−1	1	1	0	−1	−1	1	1	{(ab)(1324), (ab)(1423)}
−2	1	1	1	1	−2	1	1	1	1	(12)(34)
−2	1	1	1	1	2	1	1	1	1	E^*
0	1	−1	1	−1	0	−1	1	−1	1	(12)*, (34)*
0	−1	1	1	−1	0	1	−1	−1	1	{(ab)(13)(24)*, (ab)(14)(23)*}
0	1	1	−1	−1	0	−1	−1	1	1	{(ab)(1324)*, (ab)(1423)*}
2	−1	−1	−1	−1	−2	1	1	1	1	(12)(34)*

3. 统计权重

考虑核自旋，由于 ^{14}N 是玻色子，从群的特征标表中可以知道，整体波函数应属于 B_2^+ 和 B_2^-.

(1) 转动：选择图 8.3.6 中前两列的 8 个元素的基函数，E 作用为 8，绕垂直于轴转 180°，C_2 作用为 4，其余为 0，见表 8.3.16.

表 8.3.16　前 8 个元素的基函数所属不可约表示的特征标

C_2 对称性	E, 等					E^*, 等				
对称型	8	0	4	0	0	0	0	0	0	0
不对称型	8	0	−4	0	0	0	0	0	0	0

由此得到

对 称 转 动：$A_1^+ + B_2^+ + E^+ + A_1^- + B_2^- + E^-$

反对称转动：$A_2^+ + B_1^+ + E^+ + A_2^- + B_1^- + E^-$

(2) 类似地得到 ^{1}H 自旋的不可约表示

$$^5A_1^+,\ ^3B_1^+,\ ^3E^+,\ ^1A_1^+,\ ^1B_2^+$$

(3) ^{14}N 自旋的不可约表示为

$$^5A_1^+;\ ^3B_1^+,\ ^1A_1^+$$

由上可得统计权重：转动不可约表示⊗^{14}N 自旋的不可约表示⊗^{1}H 自旋的不可约表示⊂B_2^+, B_2^-. 以上是假定电子态、振动态都处在基态，只考虑转动和核自旋，可以给出它们的权重度，见表 8.3.17.

表 8.3.17　统计权重

平动类型	^{14}N 自旋类型	^{1}H 自旋类型	整体类型	统计权重
A_1^+, A_1^-	$^5A_1^+$, $^1A_1^+$	$^1B_2^+$	B_2^+, B_2^-	6
A_2^+, A_2^-	$^5A_1^+$, $^1A_1^+$	$^3B_1^+$	B_2^+, B_2^-	18
A_2^+, A_2^-	$^3B_1^+$	$^5A_1^+$, $^1A_1^+$	B_2^+, B_2^-	18
B_1^+, B_1^-	$^3B_1^+$	$^1B_2^+$	B_2^+, B_2^-	3
B_2^+, B_2^-	$^5A_1^+$, $^1A_1^+$	$^5A_1^+$, $^1A_1^+$	B_2^+, B_1^-	36
B_2^+, B_2^-	$^3B_1^+$	$^3B_1^+$	B_2^+, B_2^-	9
E^+, E^-	$^5A_1^+$, $^3B_1^+$, $^1A_1^+$	$^3E^+$	B_2^+, B_1^-	27

上面所例举的是处理 2 个非刚性分子光谱的例子. 对于非刚性分子，首先要找出其 CNPI 群，这可以从分子式直接得到，更重要的是求得其 MS 群，这主要是看它的等价平衡构型能否互变，如左旋能否变到右旋等. NH_3 能实现左旋、右旋互变，而 CH_4 就不能，MS 群的关键就是要抓住能实现互变的群元素.

得到 MS 群后要构造其特征标表，然后充分利用特征标表来处理问题，如讨论振动光谱的能级分类、转动光谱的能级分类以及内旋转光谱的能级分类. 讨论转动光谱时要考虑自旋，讨论电子光谱除考虑电子空间坐标之外，也要考虑电子的自旋. 电子是费米子，电子的自旋都是 1/2；而讨论全同核时，全同核有各种各样，既有玻色子，又有费米子. 因此，要具体地讨论它们核自旋的不可约表示. 有了转动、振动、核自旋、电子的不可约表示，最后，这些不可约表示合起来，它们还要满足总的关于不可约表示的要求，即玻色子交换不变号，费米子交换变号，按此，才能得知电子态和振动态处于某一确定态

时核自旋与哪种转动合起来，才能得到统计权重，统计权重代表丰度和光谱强度.

分子对称群有广阔的应用前景，可以用它讨论分子间的弱相互作用，如氢键. 当前分子对称群最重要的应用是讨论非刚性分子的光谱.

8.4 准刚性分子振动光谱的群论分析

8.4.1 准刚性分子的振动光谱的简正振动分析

本章开始定义准刚性分子为分子中的原子核(或原子实)，在平衡位置附近做微小的振动. 一个分子的内部振动运动是很复杂的，但我们可把它看成是许多相当简单的振动组合而成的，这些简单的振动称为简正振动. 它们是由分子的简正方式振动所产生的，分子的每个这种简正振动都有其固定的振动频率，这种频率称为基频. 分子的这种简正振动是由分子本身的对称性所决定的，分子的简正振动方式可用简正振动坐标表示，它们具有分子本身的对称性. 将分子中的原子人为地看成是静止的，分子可有许多对称元素. 然而，分子中的原子决不是真的静止不动的，因此，对称元素可认为是存在于分子的平衡构型中.

在一个给定的分子构型中，有多少个固有的简正振动频率，其中哪些简正振动是红外活性，哪些简正振动是拉曼活性的，这是化学工作者最关心的问题.

分子中的每一个原子都有三个运动自由度，在一个由 N 个原子组成的分子中，共有 $3N$ 个运动自由度，其中有三个运动是属于分子的平移运动，即分子质心的平移. 如 N 个原子都在 x 方向上同时移动一个相同的距离，y，z 方向也如此. 另外分子中所有原子绕 x，y，z 三个轴的转动运动，形成三个转动自由度. 因此，分子的振动自由度数为 $3N-6$. 对线型分子来说，绕原子核轴的转动运动对分子转动运动自由度没有贡献，所以线型分子只有二个转动自由度. 因此，线性分子的振动自由度为 $3N-5$.

一个分子所具有的振动自由度完全取决于其分子原子核的位置的坐标数目. 简正振动方式数目等于该分子所具有的振动自由度数目.

8.4.2 群论方法解析简正振动的理论基础

群论解析分子的简正振动是统一考虑 N 个原子对分子所属点群每类特征标的贡献，然后减去分子平动和转动的特征标，得到该分子简正振动模式的可约表示，然后再将它分解为不可约表示.

分子平动运动对特征标的贡献可以化为分子质心运动对特征标的贡献. 以质心运动坐标 x，y，z 为基的三维空间运动，和平动运动坐标 $Q_{x,\text{平动}}$，$Q_{y,\text{平动}}$，$Q_{z,\text{平动}}$ 仅差一常数 $(\sum_{j=1}^{N} m_j)^{1/2}$. 因此绕 z 轴的逆时针转动 ψ 角对特征标的贡献为

$$\begin{cases} R^{\text{平动}}(\psi)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ \chi^{\text{平动}}(R(\psi)) = 1 + 2\cos\psi \end{cases} \tag{8.4.1}$$

同样对转动反射有

$$\chi^{平动}(S(\psi)) = -1 + 2\cos\Phi$$

分子转动运动总是绕着某一轴的运动. 以质心为原点绕 x 轴转动角速度为 $\boldsymbol{\omega}_x = (\omega, 0, 0)$，第 j 个原子平衡位置到质心距离为 $\boldsymbol{R}_j = (x_j, y_j, z_j)$，第 j 个原子绕 x 轴转动速度为 $\boldsymbol{\omega}_x \times \boldsymbol{R}_j$. 直角坐标中 j 原子 β 分量转动坐标为

$$Q_{x转动, j\beta} = F_x \sqrt{m_j}(\boldsymbol{\omega}_x \times \boldsymbol{R}_j)_\beta$$

其中：F_x 为常数，m_j 为第 j 个原子质量，β 表示 x, y, z. 利用归一化条件可求得 F_x.

$$\sum_{j=1}^{N} \sum_{\beta=x,y,z} (Q_{x转动, j\beta})^2 = F_x^2 \sum_{j=1}^{N} m_j \omega^2 \times (y_j^2 + z_j^2) = 1$$

定义绕 x 轴转动惯量为

$$I_x = \sum_{j=1}^{N} m_j (y_j^2 + z_j^2)$$

$$Q_{x转动, j\beta} = \sqrt{m_j}(\boldsymbol{\omega}_x \times \boldsymbol{R}_j)_\beta / (\omega \sqrt{I_x})$$

绕 x 轴总转动坐标为

$$Q_{x转动} = \sum_{j=1}^{N} \sum_{\beta=x,y,z} Q_{x转动, j\beta} \cdot \sqrt{m_j}(j\beta)_{x转动}$$

把 $Q_{x转动, j\beta}$ 代入上式得到

$$Q_{x转动} = \sum_{j=1}^{N} m_j (\boldsymbol{R}_j \times \boldsymbol{r}_{j, x转动})_x / \sqrt{I_x}$$

其中 $\boldsymbol{r}_{j, x转动}$ 表示第 j 个原子的矢量，绕 x 轴的转动矢量 $(\boldsymbol{R}_j \times \boldsymbol{r}_{j, x转动})_x$ 对原子求和相当一个总的绕 x 轴转动 R_x. 对 y, z 方向同样有

$$Q_{y转动} = \sum_{j=1}^{N} m_j (\boldsymbol{R}_j \times \boldsymbol{r}_{j, y转动})_y / \sqrt{I_y}$$

$$Q_{z转动} = \sum_{j=1}^{N} m_j (\boldsymbol{R}_j \times \boldsymbol{r}_{j, z转动})_z / \sqrt{I_z}$$

所以分子三个转动基函数 $Q_{x转动}$，$Q_{y转动}$，$Q_{z转动}$ 可以用 R_x，R_y，R_z 三个基函数来代替. 先讨论整个分子的转动和转动反射 ψ 角中的表示矩阵.

绕 z 轴转动 ψ 角的表示矩阵：

$$R^{转动}(\psi) = \begin{pmatrix} R_x \\ R_y \\ R_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_x \\ R_y \\ R_z \end{pmatrix} \tag{8.4.2}$$

$$\chi^{转动}(R(\psi)) = 1 + 2\cos\psi$$

绕 z 轴转动反射 ψ 角的表示矩阵：

$$S^{转动}(\psi) = \begin{pmatrix} R_x \\ R_y \\ R_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & -\cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_x \\ R_y \\ R_z \end{pmatrix} \tag{8.4.3}$$

$$\chi^{转动}(S(\psi)) = 1 - 2\cos\psi$$

分子中所有的对称操作均可用绕 z 轴的转动和转动反射来表示. 对称面 σ 和对称中

心 i 分别用转动反射 $S(0°)$ 和 $S(180°)$ 表示，绕 z 轴转动 ψ 角的表示矩阵为

$$R(\psi) = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{8.4.4}$$

$$\chi(R(\psi)) = 1 + 2\cos\psi$$

绕 z 轴转动反射 ψ 角表示矩阵为

$$S(\psi) = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{8.4.5}$$

$$\chi(S(\psi)) = -1 + 2\cos\psi$$

在对称操作 $R(\psi)$ 和 $S(\psi)$ 作用下，分子中有 U_R 个原子不动，则对特征标总的贡献为

$$\chi^{总}(R(\psi)) = U_R(1 + 2\cos\psi) \tag{8.4.6}$$

$$\chi^{总}(S(\psi)) = U_R(-1 + 2\cos\psi) \tag{8.4.7}$$

从(8.4.6)，(8.4.7)式中分别除去分子平动和转动特征标得到了分子简正振动模式的可约表示特征标：

$$\begin{aligned} \chi^{振动}(R(\psi)) &= \chi^{总}(R(\psi)) - \chi^{平动}(R(\psi)) - \chi^{转动}(R(\psi)) \\ &= (U_R - 2)(1 + 2\cos\psi) \end{aligned} \tag{8.4.8}$$

$$\begin{aligned} \chi^{振动}(S(\psi)) &= \chi^{总}(S(\psi)) - \chi^{平动}(S(\psi)) - \chi^{转动}(S(\psi)) \\ &= U_R(-1 + 2\cos\psi) \end{aligned} \tag{8.4.9}$$

简正振动模式的可约表示特征标用下式分解为不可约表示特征标之和：

$$a_i = \frac{1}{h}\sum_R \chi^i(R) \cdot \chi^\Gamma(R) \tag{8.4.10}$$

应用(8.4.8)～(8.4.10)三式，用 FORTRAN 语言编制了红外简正振动分析计算程序，有兴趣同志可参阅“《化学通报》1993 年 1 期 59 页，群论解析化合物振动光谱的微机程序”一文.

8.4.3 分子简正振动分析举例

首先我们以 BF_3 为例，分析简正振动方式，该分子属于 D_{3h} 对称性，它有 6 个简正振动方式.

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
$\psi(°)$	0	120	180	0	120	0
$2\cos\psi$	2	-1	-2	2	-1	2
U_R	4	1	2	4	1	2
Γ_{vib}	6	0	0	4	-2	2

计算 Γ_{vib} 时，E，$2C_3$，$3C_2$ 用公式(8.4.8)，而 σ_h，$2S_3$，$3\sigma_v$ 用转动反射的公式(8.4.9)，对可约的简正振动特征标 Γ_{vib}，再用(8.4.10)分解得到

$$\Gamma_{vib}=A_1'(R)+A_2''(IR)+2E'(IR/R)$$

其中括号内 IR 表示简正振动是红外活性的，而 R 是拉曼活性的. 两种活性是由不可约特征表中的基矢性质所决定的. 再举一个 C_6H_6 例子. C_6H_6 属于 D_{6h}点群，简正振动模式 3N－6 为 30 个. 坐标如图 8.4.1 所示.

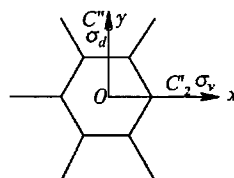


图 8.4.1　苯分子的坐标

D_{6h}	E	$3C_6$	$3C_3$	C_2	$3C'_2$	$3C''_2$	i	$2S_3$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
$\psi(°)$	0	60	120	180	180	180	180	120	60	0	0	0
U_R	12	0	0	0	4	0	0	0	0	12	0	4
χ_{vib}	30	−4	0	2	−2	2	0	0	0	12	0	4
$U_R^{骨架}$	6	0	0	0	2	0	0	0	0	6	0	2
$\chi^{骨架}$	12	−4	0	2	0	2	0	0	0	6	0	2
$\chi^{C—H}$	6	0	0	0	2	0	0	0	0	6	0	2
$\chi^{C—C}$	6	0	0	0	0	2	0	0	0	6	2	0
$\chi^{C—H面外}$	6	0	0	0	−2	0	0	0	0	−6	0	2

分解χ_{vib}得 C_6H_6 振动模式不可约表示为

$$\Gamma_{vib}=2A_{1g}(R)+A_{2g}+2B_{1g}+E_{1g}(R)+4E_{2g}(R)+A_{2u}(IR)+2B_{1u}+2B_{2u}+3E_{1g}(IR)+2E_{2u}$$

用同样的方法可以讨论苯分子骨架 C_6 的简正振动模式 12 个. 骨架 C_6 简正振动模式的特性标列于上表.

分解$\chi^{骨架}$骨架 C_6 键振动模式不可约表示为

$$\Gamma_{vib}^{骨架}=A_{1g}(R)+B_{2g}+2E_{2g}+B_{1u}+B_{2u}+E_{1u}(IR)+E_{2u}$$

若把苯分子的 C—H 键拉伸振动模式作为基矢，用 D_{6h}的每类中一个群元素作用得到可约表示的特征标列于上表，分解可约表示特征标$\chi^{C—H}$，得 C—H 键拉伸振动模式不可约表示为

$$\Gamma_{vib}^{C—H}=A_{1g}(R)+B_{1u}+E_{1u}(IR)+E_{2g}$$

上表中的 C—H 正键的面外振动模式的特征标分解为

$$\Gamma_{vib}^{C—H面外}=A_{2u}(IR)+B_{2g}+E_{2u}+E_{1g}(R)$$

同样，苯分子的正键伸缩振动模式可分解为

$$\Gamma_{vib}^{C—C}=A_{1g}(R)+B_{2u}+E_{1u}(IR)+E_{2g}$$

C_6 骨架中变角振动模式为

$$\Gamma_{vib}^{骨架变角}=T_{vib}^{shel}-T_{vib}^{c-c}=B_{1u}+B_{2g}+E_{2u}+E_{2g}$$

苯分子的简正振动由骨架的简正振动和 C—H 键的拉伸振动模式及∠HCC 的变角振动模式构成的，所以∠HCC 的变角振动模式不可约表示为

$$\begin{aligned}\Gamma_{vib}^{变角}&=\Gamma_{vib}-\Gamma_{vib}^{骨架}-\Gamma_{vib}^{C—H}\\&=A_{2g}+B_{1g}+E_{1g}(R)+E_{2g}+A_{2u}(IR)+B_{2u}+E_{1u}(IR)+E_{2u}\end{aligned}$$

8.4.4 配合物振动光谱的简正振动解析

用(8.4.8)和(8.4.9)两式可以解析复杂配合物简正振动模式，把每类元素的转动或转动反射 ψ 角和 $2\cos\psi$，不动原子数 U_R 以及可约表示特征标 $\chi^{振动}$ 均列在表中.

$Cu(NH_3)^{2}_{-4}$是属于 C_{4h}点群，它的简振动模式 3N－6 为45：

C_{4h}	E	C_4	C_2	C_4^3	i	S_4^3	σ_h	S_4
$\psi(°)$	0	90	180	270	180	270	0	90
$2\cos\psi$	2	0	−2	0	−2	0	2	0
U_R	17	1	1	1	1	1	9	1
$\chi^{振动}$	45	−1	1	−1	−3	−1	9	−1
$U_R^{骨架}$	5	1	1	1	1	1	5	1
$\chi^{骨架}$	9	−1	1	−1	−3	−1	5	−1

然后用(8.4.10)式分解$\chi^{振动}$得

$$\Gamma_{vib}=6A_g(R)+7B_g(R)+4E_g(R)+5A_u(IR)+5B_u+7E_u(IR)$$

同样可得到骨架 CuN_4 振动模式的不可约表示

$$\Gamma_{vib}^{骨架}=A_{1g}(R)+2B_g(R)+A_u(IR)+B_u+2E_u(IR)$$

其中 IR 表示红外活性，R 表示拉曼活性.

$Zn(NH_3)_4^{2-}$ 属于 T_d 点群，简正振动模式为45个：

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$
$\psi(°)$	0	120	180	90	0
$2\cos\psi$	2	−1	−2	0	2
U_R	17	2	1	1	5
$\chi^{振动}$	45	0	1	−1	5
$U_R^{骨架}$	5	2	1	1	3
$\chi^{骨架}$	9	0	1	−1	2

$$\Gamma_{vib}=3A_1(R)+A_2+4E(R)+4T_1+7T_2(IR/R)$$

$$\Gamma_{vib}^{骨架}=A_1(R)+E(R)+2T_2(IR/R)$$

8.4.5 红外简正振动在确定配合物构型中的应用

八面体羟基配合物 $M(CO)_4L_2$ 有两种异构体，分别属于 D_{4h}(反式)和 C_{2v}(顺式)对称性. 顺式异构体 C—O 的拉伸振动模式为

$$\Gamma_{vib}^{C—O}=2A_1(IR/R)+B_1(IR/R)+B_2(IR/R)$$

而反式异构体有

$$\Gamma_{vib}^{C—O}=A_{1g}(R)+B_{1g}(R)+E_u(IR)$$

理论分析表明，顺式构型应用4条红外和4条拉曼谱，反式有一条红外和二条拉曼谱.

配合物 $Mo(CO)_4[P(OPh)_3]_2$ 顺式异构在实验上测得红外有 4 条谱带 2049，1964，1947，1941 cm^{-1}，反式异构体红外谱有一条 1943 cm^{-1} 和二条拉曼谱 2054 1985 cm^{-1}. 由于 $P(OPh)_3$ 基团引起对理想的 D_{4h} 对称性的偏离，在红外谱中也观察到很弱的 1985cm^{-1}，这是由于对称性降低 E_u 分解所致.

红外光谱还可以确定配合物局部微环境对称性. 在 $Ln(AcAc)_3 \cdot Gly$ 配合物中，Ln 为 Pr、Nd、Sm、Er、Y，AcAc，是乙酰酮基，Gly 为甘氨酸. 在 50 ~ 300 cm^{-1} 范围内均出现 9 个远红外吸收峰. Ln^{3+} 的配位数可能为 7 或 8（见表 8.4.1）. Ln 的周围局部对称性可采取表 8.4.1 中 AB_7 型和 AB_8 型. 实验观察到 9 个 Ln—O 键的红外振动模式，与十二面体（D_{2d}）的 9 个红外振动模式一致. 从而确定该配合物中稀土离子周围局部对称性为 D_{2d}，配位数为 8.

表 8.4.1 AB_7 和 AB_8 构型的红外和拉曼活性

对称性	C_{2v}	C_{3v}	D_{5h}	C_{2v}	D_{2d}	O_h	D_{6h}	D_{4d}
配位数	7	7	7	8	8	8	8	8
IR 活性	15	11	5	17	9	2	5	5
R 活性	18	11	5	21	15	4	3	8

综上所述，红外光谱的振动模式分析是确定分子构型和解释溶液中金属羰基配合物红外和拉曼谱的一种非常有效的手段.

8.4.6 碳原子簇的简正振动模式解析

目前，已合成的碳原子族 $C_n(n=20, 24, 50, 60, 70, 84)$，它们的对称性为 $C_{20}(I_h)$、$C_{24}(O_h)$、$C_{50}(D_{5h})$、$C_{60}(I_h)$、$C_{70}(D_{5h})$，C_{84} 有两种构型，对称性分别为 D_{6h} 和 T_d. 由于原子数目的增多，简正振动模式的不可约分解越来越困难. 仅利用群元素作用下不动原子数目 U_R 和公式(8.4.8)和(8.4.9)，(8.4.10)分解出结果列于表 8.4.2.

表 8.4.2 碳原子簇简正振动模式分析 $C_n(n=20, 24, 50, 60, 70, 84)$

C_n	I_h	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	15σ
C_{20}	U_R	20	0	0	0	0	0	0	0	0	4
	χ	54	-3.2361	1.2361	0	2	0	0	0	0	4
	$\Gamma_{vib}=1A_{1g}(R)+T_{2g}+2G_g+3H_g(R)+T_{1u}(IR)+2T_{2u}+2G_u+2H_u$										
C_{60}	U_R	60	0	0	0	0	0	0	0	0	4
	χ	174	-3.2361	1.2361	0	2	0	0	0	0	4
	$\Gamma_{vib}=2A_g(R)+3T_{1g}+4T_{1u}(R)+8H_g(R)+A_u+4T_{1u}(IR)+5T_{2u}+6G_u+7H_u$										
C_n	O_h	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
C_{24}	U_R	24	0	0	0	0	0	0	0	0	4
	χ	66	0	2	-2	2	0	0	0	0	4
	$\Gamma_{vib}=2A_{1g}(R)+A_{2g}+3E_g(R)+3T_{1g}+5T_{2g}(R)+A_{1u}+2A_{2u}+3E_u+4T_{1u}(IR)+4T_{2u}$										

C_n	D_{5h}	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	σ_h	$2S_5$	$2S_5^3$	$5\sigma_v$
C_{50}	U_R	50	0	0	0	10	0	0	4
	χ	144	−3.2361	1.2361	2	10	0	0	4
$\Gamma_{vib}=9A'_1(R)+6A'_2+6A''_1+7A''_2(IR)+15E'_1(IR)+16E'_2(R)+13E''_1(R)+14E''_2$									
C_{70}	U_R	70	0	0	0	10	0	0	4
	χ	204	−3.2361	1.2361	2	10	0	0	4
$\Gamma_{vib}=12A'_1(R)+9A'_2+21E'_1(IR)+22E'_2(R)+9A''_1+10A''_2(IR)+19E''_1(R)+20E''_2$									

C_n	D_{6h}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C'_2$	$3C''_2$	i	$2S_3$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_d$	$2\sigma_v$
C_{84}	U_R	84	0	0	0	0	0	0	0	0	12	8	0
	χ	246	−4	0	2	2	2	0	0	0	12	8	0
$\Gamma_{vib}=12A_{1g}(R)+9A_{2g}+11B_{1g}+9B_{2g}+19E_g(R)+22E_{2g}(R)+9A_{1u}+10A_{2u}(IR)$ $+10B_{1u}+12B_{2u}+21E_{1u}(IR)+20E_{2u}$													

第九章　Lie 群与 Lie 代数基础

本章首先给出 Lie 群的定义和无穷小生成元与无穷小算子，然后讨论 Lie 氏三个定理，在此基础上引入 Lie 代数的概念，说明了 Lie 群与 Lie 代数的关系. 之后将详细研究 Lie 代数的一般性质，讨论了 Lie 代数的根系；利用 Dynkin 图的方法论证单纯 Lie 代数的全部系列，仔细讨论全部典型 Lie 代数和例外 Lie 代数的 Cartan-Weyl 标准形式. 最后讨论 Lie 代数的 Fermi 子实现.

9.1　Lie 群与 Lie 代数

9.1.1　Lie 群的定义

在本书前八章中讨论的群都是有限群或可数的无限群，如空间群的平移子群. 这些群的元素都可用分立的指标 i 编序，$i=1, 2, 3, \cdots, N$. 对有限群，N 为一确定的整数；对可数无限群，N 为无穷大. 可数无限群在理论处理上与有限群没有原则差别，都是只讨论群集合的代数性质.

而对于另一类无限群，群元素之间是连续变化的，是不可数的，称之为连续群. 对于连续群除了要研究群集合元素间的代数性质(群乘法的代数运算)外，还须研究集合的拓扑性质，如无限不可数集合的极限、连续性质等等. 对于具有拓扑性的连续群构成了拓扑群，在拓扑群中具有非常良好拓扑性质的一大类群构成了 Lie 群. 因而在数学上弄清 Lie 群的定义，需要拓扑学的基础和微分流形的概念. 本章只对 Lie 群给出一般比较通俗的定义，而避免艰深的数学概念. 本章的讨论对于只对 Lie 群局部性质有需要的读者提供了足够的知识和理论.

定义 9.1.1(Lie 群)　假定连续群 G 的元素 g 可以用 r 个连续实参数 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \cdots, \alpha_r)$来描述，即

$$g(\boldsymbol{\alpha})=g(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r) \tag{9.1.1}$$

而且单位元素 g_0 可用零参数 $\mathbf{0}=(0, 0, \cdots, 0)$描述，即

$$g_0=g(\mathbf{0})=g(0, 0, \cdots, 0)$$

群的代数运算要求：

(1) 封闭性：以参数 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 描述的群元素 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 和 $g(\boldsymbol{\beta})$ 之积是以参数 $\boldsymbol{\gamma}$ 描述的元素 $g(\boldsymbol{\gamma})$. 则

$$g(\boldsymbol{\alpha})g(\boldsymbol{\beta})=g(\boldsymbol{\gamma}) \tag{9.1.2}$$

封闭性要求 $\boldsymbol{\gamma}$ 为 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$ 的函数，即

$$\boldsymbol{\gamma}=f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \tag{9.1.3}$$

分量式为

$$\gamma_i = f_i(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = f_i(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r; \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_r) \tag{9.1.3'}$$

称这种函数为合成函数(multiplicative function)

(2) 单位元的性质：对于以 $\mathbf{0}$ 描述的单位元，由于 $g(\mathbf{0})g(\boldsymbol{\gamma}) = g(\boldsymbol{\gamma})g(\mathbf{0})$，要求合成函数具有性质

$$f(\mathbf{0}, \boldsymbol{\gamma}) = f(\boldsymbol{\gamma}, \mathbf{0}) \tag{9.1.4}$$

(3) 逆元素要求：若 $g(\boldsymbol{\alpha})^{-1} = g(\boldsymbol{\alpha}')$ 为 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 的逆，则要求

$$f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}') = f(\boldsymbol{\alpha}', \boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{0} \tag{9.1.5}$$

(4) 结合律：按群的结合律

$$g(\boldsymbol{\alpha})(g(\boldsymbol{\beta})g(\boldsymbol{\gamma})) = (g(\boldsymbol{\alpha})g(\boldsymbol{\beta}))g(\boldsymbol{\gamma})$$

则要求

$$f(\boldsymbol{\alpha}, f(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma})) = f(f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}), \boldsymbol{\gamma}) \tag{9.1.6}$$

描述群的 r 维参数是在 r 维 Euclide 空间的一定区域内连续变化，称这个区域为群空间，记为 G_v. 合成函数的定义域为 $G_v \otimes G_v$，值域为 G_v.

如果上述连续群的合成函数在它的定义域内是连续可微函数，则为 Lie 群. 称由 r 个实参数连续变化描述的 Lie 群为 r 维 Lie 群.

由于 Lie 群的合成函数是连续可微的解析函数，可用微积分的数学工具对 Lie 群进行研究，因而 Lie 群是目前研究得最深入，理论发展得最完善的连续群.

具体 Lie 群的合成函数，即使对最简单 Lie 群也是十分复杂的. 比如 3 维旋转群 $SO(3)$ 或(R_3)，它是由 3 个参数定义的 Lie 群. 通常可选择三个 Euler 角(α, β, γ)或旋转轴的方位角(θ, φ)和绕轴转动角 φ 作为连续参数来描述群元素，在本书第三章对此已进行了介绍，并给出了它们的表达式，群空间为半径为 π 的球体. 但是对于这种简单的 Lie 群无论从(α, β, γ)或(θ, φ, ψ)来建立合成函数，其形式也都是很复杂的，但它们确实是解析函数.

虽然在建立 Lie 群理论基础时，Lie 引入了连续可微函数作为 Lie 群合成函数的基本属性，但是在 1990 年召开的巴黎国际数学家代表大会上，Hilbert 指出定义 Lie 群的函数可以只要求是连续的，而不要求可微性，也可建立起 Lie 理论，这就是著名的 Hilbert 第五问题，这个问题已为数学家所证明.

9.1.2 Lie 群的连通性和紧致性

在 Lie 群的整体性质中，连通性(connectivity)和紧致性(compact)是两个重要的性质，下面对这两种性质做一些简单的讨论.

1. Lie 群的连通性

r 维 Lie 群由 r 个在一定区域内连续变化的参数描述群元素，群元素随着参数的连续变化而变化，它们之间存在着一一对应的关系. 如果定义域内任一个参数 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r)$ 都可连续地变化到 $\mathbf{0} = (0, 0, \cdots, 0)$，因而任一群元素 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 都可连续地变化到单位元 $g(\mathbf{0})$，则称这种 Lie 群为连通 Lie 群.

如 $SO(3)$ 群，用三个 Euler 角 α, β, γ 作为群参数，它们的定义域是半径为 π 的球. 从球内任意一点(α, β, γ)出发，都可连续地变化到(0, 0, 0)，因而 $SO(3)$ 群是连通的.

但是并不是所有 Lie 群都具有这种连通性质，比如 $O(3)$ 群，它的元素由行列式为 (± 1) 的 3×3 正交矩阵构成. 行列式为 1 的部分构成了子群 $SO(3)$，这个子群包括了单位元. 但是对行列式为 -1 的群元素，却不能通过参数的连续变化而达到行列式为 1 的单位元. 实质上 $O(3)$ 群除了 3 个连续参数之外，尚存在一个分立参数，使群元素的行列式为

$$\det M=(-1)^{\beta},\quad \beta=0,\ 1$$

当 $\beta=0$ 时，给出 $O(3)$ 群中行列式为 1 的元素；当 $\beta=1$ 时，给出行列式为 (-1) 的元素. 因而 $O(3)$ 群是非连通群.

一般地讲，如果 Lie 群的群参数中存在离散形的变量，或者参数虽然是连续的，但是它们定义在一个以上的分离区间内，则称这种 Lie 群是非连通的.

Lie 群中，能连续地相互变化的元素集合称为一个叶，连通 Lie 群只有一个叶，不连通 Lie 群一定存在一个以上的叶，如 $O(n)$ 群就有两个叶. 如果 r 个参数的 Lie 群，其中第 i 个参数 α_i 存在 l_i 个分离的区间，则这个群的叶数为 $\prod_{i=1}^{r} l_i$.

2. Lie 群的紧致性

在数学上严格讨论 Lie 群的紧致性质，需要拓扑学上的覆盖(covering)概念，为了避免一些复杂的数学概念，下面只对线性 Lie 群，也就是 $n\times n$ 矩阵所构成的 Lie 群的紧致性给出比较通俗而不失严格性的说明.

首先定义矩阵集合的有界性：由 $n\times n$ 矩阵所构成的集合 U，如果存在一个常数 $A>0$，使 U 中的所有矩阵 M 的范数 $\|M\|\leqslant A$，则称矩阵集合 U 是有界的. $\|M\|\leqslant A$ 等价于存在一个常数 $K>0$，使所有 $M\in U$ 的矩阵元 m_{ij} 满足条件 $|m_{ij}|\leqslant K$. 也就是说若矩阵集合 U 中任意矩阵的矩阵元均满足 $|m_{ij}|\leqslant K$，则这个矩阵集合是有界的.

进一步还须定义矩阵集合的封闭性，如果矩阵集合 U 中所有的勾西序列都收敛于集合 U 中的一个矩阵，则称集合 U 是封闭的.

所谓集合 U 中的勾西序列 $\{M_k,\ k=1,\ 2,\ \cdots\}$ 是指对于任意 $\varepsilon>0$，均存在一个整数 $N_\varepsilon>0$，使 $i,\ j>N_\varepsilon$ 时，有 $\|M_i-M_j\|<\varepsilon$，M_i，M_j 为矩阵序列 $\{M_k,\ k=1,\ 2,\ \cdots\}$ 中的矩阵. 这就是对于矩阵范数而定义的勾西序列. 矩阵集合 U 是封闭的，就是说集合中一切符合上述条件的勾西序列的极限都在集合之中，是集合中的一个矩阵.

在这两个概念的基础上就可讨论 Lie 群的紧致性了.

定义 9.1.2(紧致线性 Lie 群)　由 $n\times n$ 矩阵构成的线性 Lie 群 G，如果是有界和封闭的矩阵集合，则为紧致 Lie 群.

一般的矩阵群，作为一个矩阵集合勾西序列都是收敛到它内部的一个矩阵，于是在这个意义下是封闭的. 因而对群的紧致性判断都归结为群集合是否有界，因而有的书把有限个有界参数构成的 Lie 群定义为紧致 Lie 群，在下面对典型群紧致性的判断，就是看有界性.

9.1.3　典型 Lie 群及其连通性与紧致性

复 n 维线性空间中的全部存在逆变换的线性变换构成一个群，称为一般线性变换

群，记为 $GL(n, \mathbf{C})$. 当在线性空间中选定一定坐标系时，线性变换的表示为 $n\times n$ 的矩阵，对于描述存在逆变换的矩阵一定是非奇异矩阵，即 $n\times n$ 矩阵 M 的行列式是非零的，$\det M\neq 0$. 因而 $GL(n, \mathbf{C})$ 群为

$$GL(n, \mathbf{C}) = \{M_{n\times n} | \det M_{n\times n}\neq 0\}$$

或

$$GL(n, \mathbf{C}) = \{M_{n\times n} - \det^{-1}(0)\}$$

为了方便以 M 表示 $n\times n$ 矩阵，m_{ij}为它的矩阵元. 因而可把 $GL(n, \mathbf{C})$群的矩阵写为

$$M = (m_{ij}) = (\delta_{ij} + x_{ij}), \quad i, j = 1, 2, \cdots, n$$

可以把 n^2 个复数 x_{ij}视为群参数，而零点附近的一个适当小的邻域内，对所有 x_{ij}均存在

$$\det M = \det(m_{ij}) = \det(\delta_{ij} + x_{ij}) \neq 0 \tag{9.1.7}$$

因而 M 所表示的矩阵在参数空间零点的一个邻域内属于 $GL(n, \mathbf{C})$群. 以$M(x_{ij}) \cong M(m_{ij})$描述这个矩阵，由矩阵乘法可得到下式

$$M(x_{ij})M(x'_{ij}) = M(x''_{ij}) \tag{9.1.8}$$

可以得到群参数 x''_{ij}是群参数 x_{ij}，x'_{ij}的解析函数. 参数空间的零点为 $GL(n, \mathbf{C})$群的单位元(单位矩阵 $E_{n\times n}$). 因而 $GL(n, \mathbf{C})$群在 n^2 维复空间由 n^2 个复参数描述，从而也是 $2n^2$ 个实参数连续变化而构成的，在零点附近的领域内其参数 $x_{ij}=0$. 它的维数为 $2n^2$.

$2n^2$ 维的 Lie 群 $GL(n, \mathbf{C})$是最大的线性变换群，它有丰富的子群，分别描述一定要求下的线性变换群. 其中 $SU(n)$群，$SO(2m+1)$群，$SO(2m)$群和 $Sp(2m)$群一般称为典型群(classical group)，后面将讨论它们的 Lie 代数分别为典型 Lie 代数 A_{n-1}，B_m，D_m 和 C_m. 下面对这几个 Lie 群进行简要介绍.

1. n 阶单模酉群($SU(n)$群)

n 阶单模酉群($SU(n)$群)是由 $n\times n$ 的行列式为 1(即单模)的酉矩阵的全体构成的群. 即：

$$SU(n) = \{M_{n\times n} | M_{n\times n}M^{+}_{n\times n} = M^{+}_{n\times n}M_{n\times n} = E_{n\times n},\ \det M_{n\times n} = 1\} \tag{9.1.9}$$

由于酉矩阵的条件

$$M_{n\times n}M^{+}_{n\times n} = M^{+}_{n\times n}M_{n\times n} = E_{n\times n}$$

对 n^2 个复数矩阵元施加了限制，使得

$$\sum_j m_{ij}m^{*}_{kj} = \delta_{ik}, \quad \sum_j m^{*}_{ji}m_{kj} = \delta_{ik} \tag{9.1.10}$$

因而 n^2 个矩阵元中的 $2n^2$ 个实数变成只有 n^2 个是自由变量，而单模条件 $\det M = 1$，又对 n^2 个自由变量施加了一个限制，因而 $SU(n)$群的独立参量只有 n^2-1 个，$SU(n)$群的维数为 n^2-1.

酉条件(9.1.10)限定了 $SU(n)$群的任一矩阵的矩阵元是有界的，即 $SU(n)$群是有界集合，因而它是紧致群.

局部 $SU(n)$群的 n^2-1 个参量定义在元点的一个邻域内，其中任意一点都可连续地变化到零点，因而是单连通群.

在这里简要说明一下 n 维酉群 $U(n)$，它是全部 $n\times n$ 的酉矩阵构成的 Lie 群，后面将讨论它的 Lie 代数群. 由于酉矩阵的行列式为

$$|\det M| = 1, \quad MM^{+} = M^{+}M$$

即

$$\det M = e^{i\alpha} \tag{9.1.11}$$

在(9.1.10)式限制下，$U(n)$即由n^2个实参数描述，它是n^2维 Lie 群，也是紧致 Lie 群. 除了(9.1.11)式中描述行列式的参数α外，其它n^2-1个参数与$SU(n)$群相同，因而$U(n)$也是连通的. 对一个固定的α，其它n^2-1个参数所描述的群元素处于一个叶上，因而$U(n)$群的连通性与$SU(n)$群不同，$SU(n)$群只有一个叶，是单连通群. 而$U(n)$群不同α有不同的叶，因而它是复连通的，而且α是连续变化的，它的连通度为无穷大.

2. *单模实正交群 $SO(n)$($n=2m$ 或 $2m+1$)*

由实的$n\times n$单模正交矩阵构成的群，称为实单模正交群，记为$SO(n)$，

$$SO(n) = \{M_{n\times n} | M_{n\times n}\tilde{M}_{n\times n} = \tilde{M}_{n\times n}M_{n\times n} = E_{n\times n},\ \det M_{n\times n} = 1\} \tag{9.1.12}$$

正交矩阵条件

$$M_{n\times n}\tilde{M}_{n\times n} = \tilde{M}_{n\times n}M_{n\times n} = E_{n\times n}$$

导致对矩阵元的限制

$$\sum_j m_{ij}m_{kj} = \delta_{ik}, \quad \sum_j m_{ji}m_{jk} = \delta_{ik} \tag{9.1.13}$$

单模条件

$$\det M_{n\times n} = 1$$

又对矩阵元施加了一个限制，因而n^2个实矩阵元中，只有$n(n-1)/2$个独立变量，所以$SO(n)$群是$n(n-1)/2$维的 Lie 群. (9.1.13)式限定了矩阵元是有界的，因而它是紧致 Lie 群. 与$SU(n)$群相同，$n(n-1)/2$个参数是连通的，因而$SO(n)$群也是单连通 Lie 群.

但是$n=2m+1$和$n=2m$的$SO(n)$群的 Lie 代数是不同的，这一点将在后面进行讨论.

如果不加单模限制，由全部$n\times n$的正交矩阵构成的 Lie 群为正交群$O(n)$，由于正交矩阵的行列式为

$$\det M_{n\times n} = \pm 1, \quad M_{n\times n}\tilde{M}_{n\times n} = \tilde{M}_{n\times n}M_{n\times n} = E_{n\times n} \tag{9.1.14}$$

因而描述$O(n)$群的独立连续参数与$SO(n)$群一样为$n(n-1)/2$个，只是增加一个描述行列式的分立参数$(-1)^{\beta}$，$\beta=0$或1. 因而$O(n)$群是非连通的，它的子群$SO(n)$处于一个叶，而$\beta=1$的群元素处于另一个叶，因而它包括两个连通部分.

3. *辛群 $Sp(2m, \mathbf{C})$，$Sp(2m, \mathbf{R})$和酉辛群 $Sp(2m)$*

定义一个$2m\times 2m$的反对称矩阵J，

$$J = \begin{pmatrix} Z & E_{m\times m} \\ -E_{m\times m} & Z \end{pmatrix}, \quad \tilde{J} = -J, \ \tilde{Z} = -Z \tag{9.1.15}$$

Z为$m\times m$的矩阵. 显然反对称矩阵J的行列式为1，即$\det J = 1$，满足条件

$$\tilde{A}\tilde{J}A = J \tag{9.1.16}$$

的矩阵A称为$2m$阶的辛矩阵(symplectic matrix)，显然$2m\times 2m$的单位矩阵是辛矩阵，

而且容易证明辛矩阵与辛矩阵之积也是辛矩阵. 因为若矩阵 A 和矩阵 B 都是辛矩阵，则

$$(\widetilde{AB})J(AB)=\tilde{B}\tilde{A}JAB=\tilde{B}JB=J$$

即 $AB=C$ 为辛矩阵，而且辛矩阵 A 的逆矩阵也是辛矩阵. 因为

$$\det(\tilde{A}JA)=\det(J)=1$$

而

$$\det(\tilde{A}JA)=\det(\tilde{A}A)\det J=\det(\tilde{A}A)=\det(A)^2$$

因此得到辛矩阵具有性质 $(\det A)^2=1$. 这表明辛矩阵 A 和 $\tilde{A}$ 都是非奇异矩阵，它们存在逆，令辛矩阵 A 的逆为 A^{-1}，则

$$\widetilde{A^{-1}}\ JA^{-1}=\widetilde{A^{-1}}\ (\tilde{A}JA)A^{-1}=J$$

从而证明 A^{-1} 也是辛矩阵，因而复 $2m\times 2m$ 的辛矩阵构成一个群称为复辛群(complex symplectic group)，记为 $Sp(2m,\mathbf{C})$.

上面虽然得到辛矩阵 A 的行列式为 $(\det A)=\pm 1$，但是对于复辛群进一步可证明它的元素只能是单模矩阵，即若 $A\in Sp(2m,\mathbf{C})$，则 $\det A=1$.

$2m\times 2m$ 的复辛矩阵有 $(2m)^2$ 个复矩阵元，辛条件(9.1.16)由于 J 是给定的反对称矩阵，对辛矩阵 A 的矩阵元提供了 $\frac{(2m)^2}{2}$ 个约束条件. 但是另一方面，由(9.1.16)式可得到

$$\widetilde{\tilde{A}J}\ A=\tilde{A}\tilde{J}A=-\tilde{A}JA \tag{9.1.17}$$

对于任何矩阵的对角元都与它的转置矩阵的对角元相同，因而(9.1.17)式说明矩阵 $\tilde{A}JA$ 的对角元为零. 这说明辛条件(9.1.16)提供的 $\frac{(2m)^2}{2}$ 个约束方程中有 m 个为 $0=0$ 的方程，因而(9.1.16)式提供的约束方程为 $\frac{(2m)^2-2m}{2}$ 个复约束方程. 从而证明了辛群的独立参数数目为

$$2(2m)^2-((2m)^2-2m)=2m(2m+1)$$

即 $Sp(2m,\mathbf{C})$ 群的维数为 $2m(2m+1)$.

实辛矩阵构成实辛群 $Sp(2m,\mathbf{R})$，它的维数为 $m(2m+1)$.

$Sp(2m,\mathbf{C})$ 和 $Sp(2m,\mathbf{R})$ 都是连通群，详细讨论 $Sp(2m,\mathbf{C})$ 为单连通群，$Sp(2m,\mathbf{R})$ 为复连通群，连通度为 ∞.

对矩阵元的约束方程(9.1.16)并不限制矩阵元为有界的，因而 $Sp(2m,\mathbf{C})$ 和 $Sp(2m,\mathbf{R})$ 都是非紧致 Lie 群.

如果限定辛群的矩阵同时也是酉矩阵，它们仍然构成群(因为酉矩阵在矩阵乘法下是封闭的，因而满足(9.1.16)的全部酉矩阵显然是一个群)，称为酉辛群(unitary symplectic group)，一般也称为辛群，记为 $Sp(2m)$. 由于酉性质，酉辛群 $Sp(2m)$ 是紧致 Lie 群，它的 Lie 代数是典型 Lie 代数 C_m 的紧致实形(这一点后面将进行讨论)，通常指的典型群为 $Sp(2m)$ 群.

9.2 Lie 群局部性质的 Lie 理论，Lie 群与 Lie 代数

9.2.1 Lie 群的无穷小生成元与无穷小变换和无穷小算子

1. 无穷小生成元

Lie 群 G 的元素 g 可由群参数 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\ \alpha_2,\ \cdots,\ \alpha_r)$ 描述为 $g(\boldsymbol{\alpha})$，单位元为 $g(\mathbf{0})$. 研究参数空间 O 点附近一个邻域 U_e 内群的性质是十分重要的，这些性质称为 Lie 群的局部性质，或者称为无穷小邻域 U_e 内无穷小 Lie 群的性质.

在 O 点邻域内，由于参数 $\boldsymbol{\alpha}$ 很小，可对群元素 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 做 Taglor 级数展开，即

$$g(\boldsymbol{\alpha}) = g(\mathbf{0}) + \sum_{i=1}^{r}\alpha_i\left(\frac{\partial g(\boldsymbol{\alpha})}{\partial\alpha_i}\right)_{\alpha_i=0} + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{r}\alpha_i\alpha_j\left(\frac{\partial g(\boldsymbol{\alpha})}{\partial\alpha_i}\right)_{\alpha_i=0}\left(\frac{\partial g(\boldsymbol{\alpha})}{\partial\alpha_j}\right)_{\alpha_j=0} + O(\boldsymbol{\alpha}^3) \tag{9.2.1}$$

令

$$X_i = \left(\frac{\partial g(\boldsymbol{\alpha})}{\partial\alpha_i}\right)_{\alpha_i=0} \tag{9.2.2}$$

称为 Lie 群的无穷小生成元(infinitesimel generator). 利用无穷小生成元可把(9.2.1)式表示为

$$g(\boldsymbol{\alpha}) = g(\mathbf{0}) + \sum_{i=1}^{r}\alpha_iX_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{r}\alpha_i\alpha_jX_iX_j + O(\boldsymbol{\alpha}^3) \tag{9.2.3}$$

对于 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 的逆元素 $g(\boldsymbol{\alpha})^{-1}$，在元点邻域 U_e 内可写为 $g(\boldsymbol{\alpha})^{-1}=g(-\boldsymbol{\alpha})$，因而它的展开式为

$$g(\boldsymbol{\alpha})^{-1} = g(\mathbf{0}) - \sum_{i=1}^{r}\alpha_iX_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{r}\alpha_i\alpha_jX_iX_j + O(\boldsymbol{\alpha}^3) \tag{9.2.4}$$

于是

$$g(\boldsymbol{\alpha})g(\boldsymbol{\alpha})^{-1} = g(\mathbf{0}) + O(\boldsymbol{\alpha}^2)$$

在无穷小的邻域 U_e 内 $\boldsymbol{\alpha}^2$ 项可以忽略，因而 $g(\boldsymbol{\alpha})^{-1}=g(-\boldsymbol{\alpha})$ 是正确的. 在关于局部性质的讨论中 $O(\boldsymbol{\alpha}^2)$ 量级以上的项都可忽略.

为了讨论无穷小生成元的性质，定义邻域 U_e 内两个群元素 $g(\boldsymbol{\beta})$，$g(\boldsymbol{\gamma})$ 的交换子为 $g(\boldsymbol{\beta})^{-1}g(\boldsymbol{\gamma})^{-1}g(\boldsymbol{\beta})g(\boldsymbol{\gamma})=g(\boldsymbol{\alpha})$，利用展开式(9.2.3)和(9.2.4)可把它表示为

$$g(\boldsymbol{\beta})^{-1}g(\boldsymbol{\gamma})^{-1}g(\boldsymbol{\beta})g(\boldsymbol{\gamma}) = g(\mathbf{0}) + \sum_{i,j=1}^{r}\beta_i\beta_j[X_i,\ X_j] \tag{9.2.5}$$

而另一方面

$$g(\boldsymbol{\beta})^{-1}g(\boldsymbol{\gamma})^{-1}g(\boldsymbol{\beta})g(\boldsymbol{\gamma}) = g(\boldsymbol{\alpha}) = g(\mathbf{0}) + \sum_{k}\alpha_kX_k \tag{9.2.6}$$

比较(9.2.5)和(9.2.6)式可得到无穷小生成元的一个重要性质，即

$$\sum_{i,j=1}^{r}\beta_i\gamma_j[X_i,\ X_j] = \sum_{k}\alpha_kX_k \tag{9.2.7}$$

令

$$\sum_{i,j} C_{ij}^{k}\beta_i\gamma_j = \alpha_k \tag{9.2.8}$$

则(9.2.7)式变为

$$[X_i, X_j] = \sum_k C_{ij}^k X_k \tag{9.2.9}$$

这是无穷小生成元的重要性质，即它们的交换关系$[X_i, X_j]$满足(9.2.9)式描述的代数结构. 称C_{ij}^k为无穷小 Lie 群 G 的结构常数(structure constant).

由无穷小生成元交换关系的定义可得到:

$$\begin{cases} [X_i, X_j] = X_iX_j - X_jX_i = -[X_j, X_i] \\ [[X_i, X_j], X_k] + [[X_j, X_k], X_i] + [[X_k, X_i], X_j] = 0 \end{cases} \tag{9.2.10}$$

称(9.2.10)的第一个式为反对称性，第二个为交换关系满足的 Jacobi 恒等式. 由(9.2.10)式容易得到结构常数 C_{ij}^k具有如下性质:

(1) 结构常数 C_{ij}^k对下标 i, j 交换是反对称的，即

$$C_{ij}^k = -C_{ji}^k \tag{9.2.11}$$

(2) 结构常数满足如下的恒等式，即

$$C_{ij}^k C_{lk}^p + C_{jl}^k C_{ik}^p + C_{li}^k C_{jk}^p = 0 \tag{9.2.12}$$

无穷小生成元的代数结构(9.2.9)式和结构常数的性质(9.2.12)式是发展 Lie 群的 Lie 代数理论的基础.

无穷小生成元也可从合成函数来定义，直接以群参数和合成函数代替群元素，比如$g(\boldsymbol{\alpha})g(\boldsymbol{\beta}) = g(f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}))$直接记为

$$(\boldsymbol{\alpha\beta}) = f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}), \quad (\boldsymbol{\alpha}\delta\boldsymbol{\alpha}) = f(\boldsymbol{\alpha}, \delta\boldsymbol{\alpha})$$

当 $\delta\boldsymbol{\alpha}$ 为无穷小量时

$$(\boldsymbol{\alpha}\delta\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\alpha} + \mathrm{d}\boldsymbol{\alpha} = f(\boldsymbol{\alpha}, \delta\boldsymbol{\alpha}) \tag{9.2.13}$$

或分量式为

$$(\boldsymbol{\alpha}\delta\boldsymbol{\alpha})_i = \alpha_i + \delta\alpha_i = f_i(\boldsymbol{\alpha}, \delta\boldsymbol{\alpha}) \tag{9.2.14}$$

把(9.2.14)式做 Taylor 级数展开，并只取第一项，得到

$$\alpha_i + \mathrm{d}\alpha_i = f_i(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{0}) + \sum_j \left.\frac{\partial f_i(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j}\right|_{\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}} \delta\beta_j$$

令

$$\left.\frac{\partial f_i(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j}\right|_{\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}} = \mu_{ij}(\boldsymbol{\alpha}) \tag{9.2.15}$$

于是

$$\mathrm{d}\alpha_i = \sum_j \delta\alpha_j \mu_{ij}(\boldsymbol{\alpha}) \tag{9.2.16}$$

定义

$$X_j = \sum_i \mu_{ij}(\boldsymbol{\alpha}) \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \tag{9.2.17}$$

称为 Lie 群 G 的无穷小生成元.

于是群元素作为群参数的函数，则有

$$g(\boldsymbol{\alpha}\delta\boldsymbol{\alpha}) = g(\boldsymbol{\alpha} + \mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}) = g(\boldsymbol{\alpha}) + \sum_i \frac{\partial g(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_i}\mathrm{d}\alpha_i$$

代入(9.2.16)式得到

$$g(\boldsymbol{\alpha}\delta\boldsymbol{\alpha}) = g(\boldsymbol{\alpha}) + \sum_i \delta\alpha_i X_i g(\boldsymbol{\alpha}) \tag{9.2.18}$$

在原点邻域内 $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{0}$，由于

$$\mu_{ij}(\mathbf{0}) = \frac{\partial f_i(\mathbf{0},\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j}\bigg|_{\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}} = \frac{\partial \beta_i}{\partial \beta_j}\bigg|_{\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}} = \delta_{ij}$$

因而

$$X_j(\mathbf{0}) = \frac{\partial}{\partial \alpha_j}$$

于是(9.2.18)式变为

$$g(\delta\boldsymbol{\alpha}) = g(\mathbf{0}) + \sum_i \delta\alpha_i \frac{\partial g(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_i}\bigg|_{\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{0}}$$

与(9.2.3)完全一样. 因而(9.2.17)式是在 $\boldsymbol{\alpha}$ 附近的邻域内定义的无穷小生成元在 $\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{0}$ 的原点邻域内与(9.2.2)式是完全等价的. 后面将看到从(9.2.17)式出发导出交换关系(9.2.9)式，并具体求出结构常数的表达式.

2. 无穷小生成元举例

为了说明无穷小生成元，下面就几个 Lie 群具体求出它们的无穷小生成元.

1° $SO(3)$群的无穷小生成元

$SO(3)$群是由 3×3 的单模实正交矩阵构成的 Lie 群，在几何上描述三维空间的所有转动. 其中任一元素 M 均有性质

$$\det M = 1, \quad \tilde{M} = M^{-1}$$

因而只包括三个实参数，可选择绕 X, Y, Z 轴的转动角，α_1, α_2, α_3 为群参数. 单位元邻域内的矩阵可写为

$$M_x(\alpha_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha_1 & -\sin\alpha_1 \\ 0 & \sin\alpha_1 & \cos\alpha_1 \end{pmatrix}$$

$$M_y(\alpha_2) = \begin{pmatrix} \cos\alpha_2 & 0 & \sin\alpha_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\alpha_2 & 0 & \cos\alpha_2 \end{pmatrix}$$

$$M_z(\alpha_3) = \begin{pmatrix} \cos\alpha_3 & -\sin\alpha_3 & 0 \\ \sin\alpha_3 & \cos\alpha_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

因而由(9.2.2)式得到它的无穷小生成元 $X_i = \dfrac{\partial M(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_i}\bigg|_{\alpha_i=0}$ 为

$$X_1=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad X_2=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\-1&0&0\end{pmatrix},\quad X_3=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}\tag{9.2.19}$$

这三个生成元满足如下的交换关系，即

$$[X_i, X_j]=\varepsilon_{ijk}X_k,\quad \varepsilon_{ijk}=\begin{cases}1, & \text{当}\ i, j, k\ \text{为}\ 1, 2, 3\ \text{的偶置换时}\\-1, & \text{当}\ i, j, k\ \text{为}\ 1, 2, 3\ \text{的奇置换时}\\0, & \text{其它}\end{cases}\tag{9.2.20}$$

后面将看到(9.2.20)式构成了 Lie 代数 $so(3)$.

2° $SU(2)$群的无穷小生成元

$SU(2)$群由 2×2 的单模复酉矩阵构成，一般可写为

$$u=\begin{pmatrix}a&b\\-b^*&a^*\end{pmatrix},\quad |a|^2+|b|^2=1\tag{9.2.21}$$

包括三个独立的实参数(α_1, α_2, α_3)，通常可把 a, b 写为

$$\begin{cases}a=(\cos\alpha_1\cos\alpha_2+\mathrm{i}\sin\alpha_1\sin\alpha_2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_3}\\ b=(-\cos\alpha_1\sin\alpha_2+\mathrm{i}\sin\alpha_1\cos\alpha_2)\end{cases}\tag{9.2.22}$$

它们自然满足$|a|^2+|b|^2=1$. 于是由(9.2.2)式得到无穷小生成元为

$$X_1=\begin{pmatrix}0&\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad X_2=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix},\quad X_3=\begin{pmatrix}\mathrm{i}&0\\0&-\mathrm{i}\end{pmatrix}\tag{9.2.23}$$

它们满足交换关系

$$[X_i, X_j]=\varepsilon_{ijk}X_k$$

一般为了消除交换关系中的 2，定义

$$X_i'=\frac{1}{2}X_i$$

于是

$$X_1'=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_1,\quad X_2'=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_2,\quad X_3'=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\mathrm{i}&0\\0&\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_3$$

而且

$$[X_i', X_j']=\varepsilon_{ijk}X_k'$$

其中

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_2=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

为 Pauli 矩阵.

容易看到 $SO(3)$群的无穷小生成元$\{X_i\}$与 $SU(2)$群的无穷小生成元$\{X_i'\}$同构，即若令

$$X_i\Leftrightarrow X_i'$$

则

$$[X_i, X_j]\Leftrightarrow[X_i', X_j']$$

因而 $SO(3)$群和 $SU(2)$群的无穷小群是同构的，或者说 $SO(3)$与 $SU(2)$局部同构. 由

(9.2.19)式和(9.2.23)式可看出这些无穷小生成元分别为反对称矩阵和反 Hermitian 矩阵.

3° $SU(3)$ 群的无穷小生成元

$SU(3)$ 群是由 3×3 的单模酉矩阵构成的 Lie 群，它有 8 个独立参数，或者说它的参数空间是实 8 维的空间，用 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_8)$ 描述一般的 3×3 的单模酉矩阵.

这种矩阵在单位元邻域内把群空间到 $\mathbf{R}$ 的映射(一般具有指数函数形式)做线性近似.

$$M(\boldsymbol{\alpha})=\begin{pmatrix} 1+\mathrm{i}\alpha_4 & \alpha_2+\mathrm{i}\alpha_5 & \alpha_2+\mathrm{i}\alpha_6 \\ -\alpha_1+\mathrm{i}\alpha_5 & 1+\mathrm{i}\alpha_7 & \alpha_3+\mathrm{i}\alpha_8 \\ -\alpha_2+\mathrm{i}\alpha_6 & -\alpha_3+\mathrm{i}\alpha_8 & 1-\mathrm{i}(\alpha_4+\alpha_7) \end{pmatrix}$$

因而(9.2.2)式可得到 $SU(3)$ 的 8 个无穷小生成元为

$$X_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad X_2=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$X_3=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},\quad X_4=\begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix}$$

$$X_5=\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad X_6=\begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$X_7=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix},\quad X_8=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$$

必须指出无穷小生成元的形式是与群元素参数化的方式有关的，它的形式是可以不同的，但是代数结构是不变的.

比如取新的参数 $\alpha_4'=\frac{1}{2}(\alpha_4-\alpha_7)$，$\alpha_7''=\frac{\sqrt{3}}{2}(\alpha_4+\alpha_7)$，其它 α_1，α_2，α_3，α_5，α_6，α_8 不变，则在新的参数下，有

$$X_4=\begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad X_7=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

再令 $X_j'=-\mathrm{i}X_j$，则得到

$$X_1'=\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad X_2'=\begin{pmatrix} 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$X_3'=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix},\quad X_4'=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$X_5' = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_6' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$X_7' = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad X_8' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

这便是 $SU(3)$ 群的 Gell-Mann 生成元.

3. 无穷小变换与无穷小算子

若 r 维 Lie 群 G 是作用于 n 维空间 V^n 上的线性变换群，即这种群由具有一定性质的 $n \times n$ 的矩阵构成，每个矩阵由 r 个连续参数描述. 则由参数 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r)$ 描述的群元素 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 作用于空间向量 $\boldsymbol{x}$，使之变换为另一向量 $\boldsymbol{x}'$，即

$$g(\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}' \qquad (9.2.24)$$

$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{x}'$ 的坐标分别为 $(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 和 $(x_1', x_2', \cdots, x_n')$，此时 $\boldsymbol{x}'$ 一定是 $\boldsymbol{x}'$ 与 $\boldsymbol{\alpha}$ 的函数，它可表示为

$$\boldsymbol{x}' = \varphi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha}) \qquad (9.2.25)$$

分量式为

$$x_i' = \varphi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha}) = \varphi_i(x_1, x_2, \cdots, x_n; \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r) \qquad (9.2.25')$$

对于 Lie 群变换函数 φ 与群的合成函数一样是解析函数. 对于单位元 $g(\boldsymbol{0})$，(9.2.19)式为

$$\boldsymbol{x} = \varphi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{0}) \quad 或 \quad x_i = \varphi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{0})$$

当群元素 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 把向量 $\boldsymbol{x}_0$ 变为 $\boldsymbol{x}$ 之后，再用 $g(\delta\boldsymbol{\alpha})$ 作用，得到

$$\begin{cases} g(\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x} = \varphi(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{\alpha}) \\ g(\delta\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{x} = \varphi(\boldsymbol{x}, \delta\boldsymbol{\alpha}) \end{cases} \qquad (9.2.26)$$

因为 $\delta\boldsymbol{\alpha}$ 是无穷小量，有

$$\begin{cases} g(\delta\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{x} = \varphi(\boldsymbol{x}, \delta\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{x} + \mathrm{d}\boldsymbol{x} \\ g(\delta\boldsymbol{\alpha})g(\boldsymbol{\alpha}) = g(\boldsymbol{\beta}) \\ \boldsymbol{\beta} = f(\delta\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}) \end{cases} \qquad (9.2.26')$$

因而

$$g(\delta\boldsymbol{\alpha})g(\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{x}_0 = g(\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{x}_0 = \varphi(\boldsymbol{x}_0, f(\delta\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})) \qquad (9.2.27)$$

当 $\delta\boldsymbol{\alpha}$ 为无穷小量时，可把 $\boldsymbol{\beta}$ 写为

$$f(\delta\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\alpha} + \mathrm{d}\boldsymbol{\alpha} \qquad (9.2.28)$$

于是得到

$$\boldsymbol{x} + \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \varphi(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{\alpha} + \mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}) = \varphi(\boldsymbol{x}, \delta\boldsymbol{x}) \qquad (9.2.29)$$

如果 Lie 群为单参数群，(9.2.26)和(9.2.29)式的几何意义可明显地表示在图 9.2.1 中. 这表明从 $\boldsymbol{x}_0$ 出发，经过变化 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 使 $\boldsymbol{x}_0$ 变换为 $\boldsymbol{x}$，然后再由 $g(\delta\boldsymbol{\alpha})$ 把 $\boldsymbol{x}$ 变为 $\boldsymbol{x} + \mathrm{d}\boldsymbol{x}$，这种变换等价于从 $\boldsymbol{x}_0$ 出发，由 $g(\boldsymbol{\alpha} + \mathrm{d}\boldsymbol{\alpha})$ 直接变换到 $\boldsymbol{x} + \mathrm{d}\boldsymbol{x}$. 对于高维参数空间上述无穷小变换也具同样的几何意义.

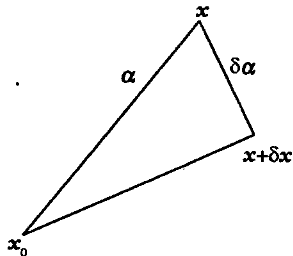


图 9.2.1 单参数 Lie 群的无穷小变化

把(9.2.29)式中的 $\varphi(\boldsymbol{x}, \delta\boldsymbol{\alpha})$ 进行 Taylor 级数展开，因为 $\delta\boldsymbol{\alpha}$ 为无穷小量，这种展开中只须取一项得到

$$\begin{aligned} x_i + \mathrm{d}x_i &= \varphi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{0}) + \sum_{j=1}^{r} \left.\frac{\partial \varphi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_j}\right|_{\alpha=0} \delta\alpha_j \\ &= x_i + \sum_{j=1}^{r} \left.\frac{\partial \varphi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_j}\right|_{\alpha=0} \delta\alpha_j \end{aligned} \tag{9.2.30}$$

令

$$\left.\frac{\partial \varphi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_j}\right|_{\alpha=0} = U_{ji}(x), \quad i=1,2,\cdots,n, \quad j=1,2,\cdots,r \tag{9.2.31}$$

则(9.2.30)式为

$$\mathrm{d}x_i = \sum_j U_{ji}(\boldsymbol{x})\delta\alpha_j \tag{9.2.32}$$

$U_{ji}(x)$是一 $r \times n$ 的矩阵，而且是 $\boldsymbol{x}$ 的函数.

当空间向量 $\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x} + \mathrm{d}\boldsymbol{x}$ 时，空间函数 $F(\boldsymbol{x})$，引起一个变化 $\mathrm{d}F(\boldsymbol{x})$，即

$$F(\boldsymbol{x} + \mathrm{d}\boldsymbol{x}) = F(\boldsymbol{x}) + \mathrm{d}F(\boldsymbol{x}) \tag{9.2.33}$$

其中

$$\mathrm{d}F(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F}{\partial x_i}\mathrm{d}x_i = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{r} U_{ji}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial F}{\partial x_i}(\boldsymbol{x})\delta\alpha_j \tag{9.2.34}$$

令

$$\hat{X}_j = \sum_{i=1}^{n} U_{ji}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} \tag{9.2.35}$$

称为 Lie 群的无穷小算子(infinitesimal operator). 用它可把(9.2.34)式中函数微小变化写为

$$\mathrm{d}F(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{r} \delta\alpha_j \hat{X}_j(\boldsymbol{x}) F(\boldsymbol{x}) \tag{9.2.36}$$

一般利用重复脚标表示求和的惯例，可把(9.2.36)式写为

$$\mathrm{d}F(\boldsymbol{x}) = \delta\alpha_j \hat{X}_j F(\boldsymbol{x}) \tag{9.2.36$'$}$$

或定义

$$\hat{S}_\alpha = 1 + \delta\alpha_j \hat{X}_j \tag{9.2.37}$$

于是

$$F(\boldsymbol{x} + \mathrm{d}\boldsymbol{x}) = \hat{S}_\alpha F(\boldsymbol{x}) \tag{9.2.38}$$

无穷小算子$\{\hat{X}_j\}$在 Lie 群中与无穷小生成元同样，都是非常重要的概念.

下面以 $SO(3)$群为例，求出它的无穷小算子.

$SO(3)$群在单位元邻域 U_e 内的矩阵可写为

$$R(\boldsymbol{\alpha}) = \begin{pmatrix} 1 & -\alpha_3 & \alpha_2 \\ \alpha_3 & 1 & -\alpha_1 \\ -\alpha_2 & \alpha_1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} \in U_e$$

因而作用于向量 $\boldsymbol{x}$ 为

$$R(\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}1 & -\alpha_3 & \alpha_2\\ \alpha_3 & 1 & -\alpha_1\\ -\alpha_2 & \alpha_1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x_1-\alpha_3x_2+\alpha_2x_3\\ \alpha_3x_1+x_2-\alpha_1x_3\\ -\alpha_2x_1+\alpha_1x_2+x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x_1'\\ x_2'\\ x_3'\end{pmatrix}$$

因而

$$\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha})=\begin{cases}\varphi_1=(x_1-\alpha_3x_2-\alpha_2x_3)\\ \varphi_2=(x_2+\alpha_3x_1-\alpha_1x_3)\\ \varphi_3=(x_3+\alpha_1x_2-\alpha_2x_1)\end{cases}$$

由(9.2.35)式无穷小算子的定义得到$SO(3)$群的无穷小算子为

$$\hat{X}_1=x_2\frac{\partial}{\partial x_3}-x_3\frac{\partial}{\partial x_2},\quad \hat{X}_2=x_3\frac{\partial}{\partial x_1}-x_1\frac{\partial}{\partial x_3},\quad \hat{X}_3=x_1\frac{\partial}{\partial x_2}-x_2\frac{\partial}{\partial x_3}$$

如果令

$$\hat{L}_x=-\mathrm{i}\hat{X}_3,\ \hat{L}_y=-\mathrm{i}\hat{X}_2,\ \hat{L}_z=-\mathrm{i}\hat{X}_1 \tag{9.2.39}$$

$\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ 为轨道角动量算子.

9.2.2 局部 Lie 群的 Lie 理论

原点邻域内 Lie 群的局部性质，或称为无穷小 Lie 群的性质，对研究 Lie 群是十分重要的. 这些理论主要是由 Lie 氏三个定理建立和发展起来的，下面就来讨论这些问题.

1. Lie 氏第一定理

定理 9.2.1(Lie 氏第一定理) Lie 群的合成函数 $\boldsymbol{\gamma}=f(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$满足如下微分方程，即

$$\frac{\partial\gamma_i}{\partial\beta_j}=\mu_{ik}(\boldsymbol{\gamma})\lambda_{kj}(\boldsymbol{\beta}) \tag{9.2.40}$$

注意在上式中对重复脚标进行求和，其中 $\mu_{ik}(\boldsymbol{\gamma})$是(9.2.15)式中定义的矩阵函数，$\lambda_{kj}(\boldsymbol{\gamma})$是$\mu_{ik}(\boldsymbol{\gamma})$的逆矩阵，即

$$[\mu(\boldsymbol{\alpha})\lambda(\boldsymbol{\alpha})]_{ij}=\sum_k\mu_{ik}(\boldsymbol{\alpha})\lambda_{kj}(\boldsymbol{\alpha})=\delta_{ij}$$

证明 令

$$\chi_{ij}(\boldsymbol{\alpha\beta},\boldsymbol{\beta})=\frac{\partial f_i(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{\partial\beta_j} \tag{9.2.41}$$

当$\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}$ 时

$$\chi_{ij}(\boldsymbol{\alpha},\mathbf{0})=\left.\frac{\partial f_i(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{\partial\beta_j}\right|_{\boldsymbol{\beta}=0}=\frac{\partial f_i(\boldsymbol{\alpha},\mathbf{0})}{\partial\beta_j}\mu_{ij}(\boldsymbol{\alpha}) \tag{9.2.42}$$

(注意$(\boldsymbol{\alpha\beta})=f(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$，当$\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}$ 时$(\boldsymbol{\alpha\beta})=f(\boldsymbol{\alpha},\mathbf{0})=\boldsymbol{\alpha}$)，当$(\boldsymbol{\alpha\beta})=\boldsymbol{\beta}$ 时

$$\chi_{ij}(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})=\frac{\partial f_i(\mathbf{0},\boldsymbol{\beta})}{\partial\beta_j},\quad \frac{\partial\beta_i}{\partial\beta_j}=\delta_{ij} \tag{9.2.43}$$

对原点邻域内 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}$，令 $\boldsymbol{\alpha}=\rho\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\beta}=\eta\boldsymbol{\gamma}$，于是 $\boldsymbol{\alpha}=\rho\eta\boldsymbol{\gamma}$

$$\alpha_i=f_i(\boldsymbol{\alpha},\mathbf{0})=f_i(\rho\eta\boldsymbol{\gamma},\mathbf{0})=f_i(\rho,f(\eta,\boldsymbol{\gamma})) \tag{9.2.44}$$

在此式中利用了合成函数的结合律，于是利用复合函数的微分法则，得到

$$\chi_{ij}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma})=\frac{\partial f_i(\boldsymbol{\alpha},\mathbf{0})}{\partial\gamma_j}=\frac{\partial f_i(\rho,\boldsymbol{\beta})}{\partial\beta_k}\frac{\partial f_k(\eta,\boldsymbol{\gamma})}{\partial\gamma_j}$$

注意到$\boldsymbol{\alpha}=\rho\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\beta}=\eta\boldsymbol{\gamma}$及(9.2.38)式，则得到

$$\chi_{ij}(\boldsymbol{\alpha},2)=\frac{\partial f_i(\boldsymbol{\alpha},\mathbf{0})}{\partial\gamma_j}=\chi_{ik}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\chi_{kj}(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma})\tag{9.2.45}$$

在(9.2.45)式中取$\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}$, $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\gamma}$, 得到

$$\chi_{ik}(\boldsymbol{\alpha},\mathbf{0})\chi_{kj}(\mathbf{0},\boldsymbol{\alpha})=\chi_{ij}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})=\delta_{ij}$$

这表明$\chi_{kj}(\mathbf{0},\boldsymbol{\alpha})$为$\chi_{ik}(\boldsymbol{\alpha},\mathbf{0})$的逆矩阵，并表示为

$$\begin{cases}\chi_{ij}(\boldsymbol{\alpha},\mathbf{0})=\mu_{ij}(\boldsymbol{\alpha})\\ \chi_{ik}(\mathbf{0},\boldsymbol{\alpha})=\lambda_{ik}(\boldsymbol{\alpha})\end{cases}\tag{9.2.46}$$

另一方面，(9.2.45)式中取$\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}$，得到

$$\chi_{ij}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma})=\chi_{ik}(\boldsymbol{\alpha},\mathbf{0})\chi_{kj}(\mathbf{0},\boldsymbol{\gamma})=\chi_{ik}(\boldsymbol{\alpha})\lambda_{kj}(\boldsymbol{\gamma})\tag{9.2.47}$$

按定义当令$\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\beta\gamma}$时

$$\chi_{ij}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma})=\chi_{ij}(\boldsymbol{\beta\gamma},\boldsymbol{\gamma})=\frac{\partial f_i(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma})}{\partial\gamma_j}=\frac{\partial\alpha_i}{\partial\gamma_j}=\mu_{ik}(\boldsymbol{\alpha})\lambda_{kj}(\boldsymbol{\gamma})\tag{9.2.48}$$

这就证明了此定理.

Lie氏第一定理给出了Lie群合成函数的变化规律. 这种规律也必然反映在Lie群作用于空间向量，引起的向量的变化规律上.

(9.2.16)式描述的参数微分变量$\mathrm{d}\alpha$与无穷小变化$\delta\alpha_i$的关系为

$$\mathrm{d}\alpha_i=\sum_j\delta\alpha_j\mu_{ij}(\boldsymbol{\alpha})$$

可用$\mu_{ij}(\boldsymbol{\alpha})$的逆矩阵$\lambda_{ij}(\boldsymbol{\alpha})$表示为

$$\delta\alpha_i=\sum_j\lambda_{ij}(\boldsymbol{\alpha})\mathrm{d}\alpha_j\tag{9.2.49}$$

于是(9.2.4)式描述的变换Lie群无穷小变换引起的空间向量$\boldsymbol{x}$的变化$\mathrm{d}x_i$可表示为

$$\begin{aligned}\mathrm{d}x_i&=\sum_j U_{ij}(x)\delta\alpha_j=\sum_{jk}=U_{ji}(x)\lambda_{jk}(\boldsymbol{\alpha})\mathrm{d}\alpha_k\\&=U_{ij}(x)\lambda_{jk}(\boldsymbol{\alpha})\mathrm{d}\alpha_k\end{aligned}\tag{9.2.50}$$

由此式立即得到微分方程

$$\frac{\partial x_i}{\partial\alpha_k}=U_{ij}(x)\lambda_{jk}(\boldsymbol{\alpha})\tag{9.2.51}$$

方程(9.2.51)描述Lie群作为变换群，群元素的变化引起所作用的空间向量的变化规律. 与Lie氏第一定理描述的群的合成函数的变化规律是等价的，因而有的书把方程(9.2.51)式称为Lie氏第一定理.

2. Lie氏第二定理与第三定理

定理9.2.2(Lie氏第二定理)　Lie群G的无穷小生成元$\{X_i\}$满足如下的交换关系，即

$$[X_i,X_j]=C_{ij}^kX_k\tag{9.2.52}$$

其中C_{ij}^k为结构常数.

定理 9.2.3(Lie 氏第三定理) Lie 群 G 的结构常数 C_{ij}^k 满足如下性质，即

$$C_{ij}^k = -C_{ji}^k, \quad C_{ij}^k C_{kq}^p + C_{iq}^k C_{ki}^p + C_{qi}^k C_{kj}^p = 0 \tag{9.2.53}$$

这两个定理在把无穷小算子定义为(9.2.2)式时，已给出了证明(见(9.2.9)，(9.2.11)和(9.2.12)式)．为了具体得到(9.2.8)式给出的结构常数，下面对 Lie 氏第二定理进行严格证明，并推导出结构常数的表达式.

第二定理的证明：

按(9.2.20)式，无穷小生成元为

$$X_j = \sum_i \mu_{ij}(\boldsymbol{\alpha}) \frac{\partial}{\partial \alpha_i} = \mu_{ij}(\boldsymbol{\alpha}) \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \tag{9.2.54}$$

重复脚标表示求和，于是

$$\begin{aligned}[X_i, X_j] &= \mu_{ki}(\boldsymbol{\alpha}) \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \mu_{lj}(\boldsymbol{\alpha}) \frac{\partial}{\partial \alpha_l} - \mu_{lj}(\boldsymbol{\alpha}) \frac{\partial}{\partial \alpha_l} \mu_{ki}(\boldsymbol{\alpha}) \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \\ &= \left\{ \mu_{li}(\boldsymbol{\alpha}) \frac{\partial \mu_{kj}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_l} - \mu_{lj}(\boldsymbol{\alpha}) \frac{\partial \mu_{ki}(\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_l} \right\} \frac{\partial}{\partial \alpha_k}\end{aligned} \tag{9.2.55}$$

由于合成函数具有连续可微性，因而

$$\frac{\partial^2 f_i(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_k \partial \beta_l} = \frac{\partial^2 f_i(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_l \partial \beta_k}$$

令 $\boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{\alpha\beta})$，并利用 Lie 氏第一定理(9.2.39)式，可以得到

$$\frac{\partial}{\partial \beta_k} \mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma}) \lambda_{jl}(\boldsymbol{\beta}) = \frac{\partial}{\partial \beta_l} \mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma}) \lambda_{jk}(\boldsymbol{\beta}) \tag{9.2.56}$$

而且

$$\frac{\partial}{\partial \beta_k} \mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma}) = \frac{\partial \mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_p} \frac{\partial \gamma_p}{\partial \beta_k} = \frac{\partial \mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_p} \mu_{pq}(\boldsymbol{\gamma}) \lambda_{qk}(\boldsymbol{\beta})$$

于是(9.2.56)式变为

$$\begin{aligned}&\frac{\partial \mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_p} \mu_{pq}(\boldsymbol{\gamma}) [\lambda_{qk}(\boldsymbol{\beta}) \lambda_{jl}(\boldsymbol{\beta}) - \lambda_{ql}(\boldsymbol{\beta}) \lambda_{jk}(\boldsymbol{\beta})] \\ &= \mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma}) \left[\frac{\partial \lambda_{jk}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_l} - \frac{\partial \lambda_{jl}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_k} \right].\end{aligned}$$

对求和与变数进行替换，得到

$$\begin{aligned}&\left[\frac{\partial \mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_p} \mu_{pq}(\boldsymbol{\gamma}) - \frac{\partial \mu_{iq}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_p} \mu_{pj}(\boldsymbol{\gamma}) \right] \lambda_{qk}(\boldsymbol{\beta}) \lambda_{jl}(\boldsymbol{\beta}) \\ &= \mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma}) \left[\frac{\partial \lambda_{jk}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_l} - \frac{\partial \lambda_{jl}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_k} \right]\end{aligned}$$

由 $\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{\beta})$ 和 $\boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\beta})$ 互为逆矩阵的性质，可得到

$$\begin{aligned}&\left[\frac{\partial \mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_p} \mu_{pq}(\boldsymbol{\gamma}) - \frac{\partial \mu_{iq}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial \gamma_p} \mu_{pj}(\boldsymbol{\gamma}) \right] \lambda_{si}(\boldsymbol{\gamma}) \\ &= \left[\frac{\partial \lambda_{sk}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_l} - \frac{\partial \lambda_{sl}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_k} \right] \mu_{kq}(\boldsymbol{\beta}) \mu_{lj}(\boldsymbol{\beta})\end{aligned} \tag{9.2.57}$$

上式右端为 $\boldsymbol{\beta}$ 的函数，左端为 $\boldsymbol{\gamma}$ 的函数，因而它们只能各为常数，而且这个常数只与非

求和脚标(非重复脚标)q, j, s 有关，因而令它为

$$C^s_{qj} = \left[\frac{\partial\mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial\gamma_p}\mu_{pq}(\boldsymbol{\gamma}) - \frac{\partial\mu_{iq}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial\gamma_p}\mu_{pj}(\boldsymbol{\gamma})\right]\lambda_{si}(\boldsymbol{\gamma})$$

$$= \left[\frac{\partial\lambda_{sk}(\boldsymbol{\beta})}{\partial\beta_l} - \frac{\partial\lambda_{sl}(\boldsymbol{\beta})}{\partial\beta_k}\right]\mu_{kq}(\boldsymbol{\beta})\mu_{lj}(\boldsymbol{\beta}) \tag{9.2.58}$$

由此得到

$$C^s_{qj}\mu_{is}(\boldsymbol{\gamma}) = \frac{\partial\mu_{ij}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial\gamma_p}\mu_{pq}(\boldsymbol{\gamma}) - \frac{\partial\mu_{iq}(\boldsymbol{\gamma})}{\partial\gamma_p}\mu_{pj}(\boldsymbol{\gamma}) \tag{9.2.59}$$

把它代入(9.5.55)式，最后得到

$$[X_i, X_j] = C^s_{ij}\mu_{ks}(\boldsymbol{\alpha})\frac{\partial}{\partial\alpha_k} = C^s_{ij}X_s \tag{9.2.60}$$

这就证明了第二定理.

对于(9.2.35)式定义的无穷小算子

$$\hat{X}_j = \sum_{i=1}^{n} U_{ji}(x)\frac{\partial}{\partial x_i} \tag{9.2.60'}$$

通过类似的计算也可得到它的交换关系，同样为(9.2.52)式，而且结构常数同样由(9.2.58)式表示. 为了看到这一重要结果，按定义计算如下：

$$\begin{aligned}
[\hat{X}_i, \hat{X}_j] &= \hat{X}_i\hat{X}_j - \hat{X}_j\hat{X}_i \\
&= u_{i\sigma}(x)\frac{\partial}{\partial x_\sigma}u_{j\rho}(x)\frac{\partial}{\partial x_\rho} - u_{j\rho}(x)\frac{\partial}{\partial x_\rho}u_{i\sigma}(x)\frac{\partial}{\partial x_\sigma} \\
&= u_{i\sigma}(x)\frac{\partial u_{j\rho}(x)}{\partial x_\sigma}\frac{\partial}{\partial x_\rho} + u_{i\sigma}(x)u_{i\rho}(x)\frac{\partial^2}{\partial x_\sigma\partial x_\rho}\frac{\partial}{\partial x_\rho} \\
&= u_{i\rho}(x)\frac{\partial u_{j\sigma}(x)}{\partial x_\rho}\frac{\partial}{\partial x_\sigma} - u_{j\rho}(x)u_{i\sigma}(x)\frac{\partial^2}{\partial x_\rho\partial x_\sigma}\frac{\partial}{\partial x_\rho} \\
&= \left[u_{i\sigma}(x)\frac{\partial u_{j\rho}(x)}{\partial x_\sigma} - u_{j\sigma}(x)\frac{\partial u_{i\rho}(x)}{\partial x_\sigma}\right]\frac{\partial}{\partial x_\rho}
\end{aligned} \tag{9.2.61}$$

利用(9.2.50)式$\frac{\partial x_i}{\partial\alpha_j} = u_{li}(x)\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha})$可得到

$$\frac{\partial^2 x_i}{\partial\alpha_k\partial\alpha_j} = \frac{\partial}{\partial\alpha_k}[u_{li}(x)\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha})] = \frac{\partial u_{li}(x)}{\partial x_\sigma}\frac{\partial x_\sigma}{\partial\alpha_k}\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha}) + u_{li}(x)\frac{\partial}{\partial\alpha_k}\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha})$$

$$\frac{\partial^2 x_i}{\partial\alpha_j\partial\alpha_k} = \frac{\partial}{\partial\alpha_j}[u_{li}(x)\lambda_{kl}(\boldsymbol{\alpha})] = \frac{\partial u_{li}(x)}{\partial x_\sigma}\frac{\partial x_\sigma}{\partial\alpha_j}\lambda_{kl}(\boldsymbol{\alpha}) + u_{li}(x)\frac{\partial}{\partial\alpha_j}\lambda_{kl}(\boldsymbol{\alpha})$$

由此得到

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial u_{li}(x)}{\partial x_\sigma}\frac{\partial x_\sigma}{\partial\alpha_k}\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha}) - \frac{\partial u_{li}(x)}{\partial x_\sigma}\frac{\partial x_\sigma}{\partial\alpha_j}\lambda_{kl}(\boldsymbol{\alpha}) \\
&= \lambda_{li}(x)\frac{\partial}{\partial\alpha_j}\lambda_{kl}(\boldsymbol{\alpha}) - u_{li}(x)\frac{\partial}{\partial\alpha_k}\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha})
\end{aligned}$$

在上式左端代入(9.2.61)式得到

$$\frac{\partial u_{li}(x)}{\partial x_\sigma}u_{\rho\sigma}(x)\lambda_{k\rho}(\boldsymbol{\alpha})\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha}) - \frac{\partial u_{li}(x)}{\partial x_\sigma}u_{\rho\sigma}(x)\lambda_{j\rho}(\boldsymbol{\alpha})\lambda_{kl}(\boldsymbol{\alpha})$$
$$= \left[\frac{\partial u_{li}(x)}{\partial x_\sigma}u_{\rho\sigma}(x) - \frac{\partial u_{\rho i}(x)}{\partial x_\sigma}u_{l\sigma}(x)\right]\lambda_{k\rho}(\boldsymbol{\alpha})\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha})$$
$$= u_{li}(x)\left[\frac{\partial}{\partial\alpha_j}\lambda_{kl}(\boldsymbol{\alpha}) - \frac{\partial}{\partial\alpha_k}\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha})\right]$$

在上式中两端乘以$\mu_{pk}(\boldsymbol{\alpha})\mu_{qj}(\boldsymbol{\alpha})$并对$j$, k求和，利用$\{\lambda\}$与$\{\mu\}$互为逆矩阵的性质可得到

$$\frac{\partial u_{qi}(x)}{\partial x_\sigma}u_{p\sigma}(x) - \frac{\partial u_{pi}(x)}{\partial x_\sigma}u_{\rho\sigma}(x)$$
$$= u_{li}(x)\left[\frac{\partial}{\partial\alpha_j}\lambda_{kl}(\boldsymbol{\alpha}) - \frac{\partial}{\partial\alpha_k}\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha})\right]\mu_{pk}(\boldsymbol{\alpha})\mu_{qj}(\boldsymbol{\alpha})$$
$$= C_{pq}^l(\boldsymbol{\alpha})u_{li}(x) \tag{9.2.62}$$

其中

$$C_{pq}^l(\boldsymbol{\alpha}) = \left[\frac{\partial}{\partial\alpha_j}\lambda_{kl}(\boldsymbol{\alpha}) - \frac{\partial}{\partial\alpha_k}\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha})\right]\mu_{pk}(\boldsymbol{\alpha})\mu_{qj}(\boldsymbol{\alpha}) \tag{9.2.63}$$

对(9.2.62)求偏微商$\frac{\partial}{\partial\alpha_\tau}$得到

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_\tau}C_{pq}^l(\boldsymbol{\alpha})u_{li}(x) = 0$$

由此得到

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_\tau}C_{pq}^l(\boldsymbol{\alpha}) = 0 \tag{9.2.64}$$

即$C_{pq}^l(\boldsymbol{\alpha})$为一与$\boldsymbol{\alpha}$无关的常数.

$$C_{pq}^l = \left[\frac{\partial}{\partial\alpha_j}\lambda_l(\boldsymbol{\alpha}) - \frac{\partial}{\partial\alpha_k}\lambda_{jl}(\boldsymbol{\alpha})\right]\mu_{pk}(\boldsymbol{\alpha})\mu_{qj}(\boldsymbol{\alpha}) \tag{9.2.64'}$$

最后得到

$$[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = C_{ij}^l u_{l\rho}\frac{\partial}{\partial x_\rho} = C_{ij}^l\hat{X}_l \tag{9.2.65}$$

9.2.3 Lie 代数

1. Lie 代数的定义

定理9.2.2说明r维Lie群的r个无穷小算子$\{\hat{X}_i\}$构成一个r维的Lie代数. 为了说明这一问题，下面给出Lie代数的定义.

定义9.2.1(Lie代数) 设g是数域K(或为复数域$\mathbf{C}$，或为实数域$\mathbf{R}$)上的r-维线性空间，空间g中的任意两个元素X, $Y\in g$，定义一个Lie乘积$[X, Y]$，对于Lie乘积g是封闭的，即若

$$X, Y \in g$$

则

$$[X, Y] \in g$$

Lie 乘积满足如下条件：

(1) Lie 乘积具有双线性，即若 a, $b \in K$, X, Y, $Z \in g$, 则有

$$\begin{cases} [aX + bY, Z] = a[X, Z] + b[Y, Z] \\ [Z, aX + bY] = a[Z, X] + b[Z, Y] \end{cases} \tag{9.2.66}$$

(2)斜对称性，即对任意 $X \in g$

$$[X, X] = 0$$

(3)存在如下的 Jacobi 恒等式，即对任意 X, Y, $Z \in g$, 有

$$[[X, Y], Z] + [[Y, Z], X] + [[Z, X], Y] = 0 \tag{9.2.67}$$

则称线性空间 g 为 Lie 代数.

与第一章曾讨论过的一般线性代数相比较，如果把 Lie 乘积视为代数中的积，则 Lie 代数满足一般代数的定义，因而 Lie 代数也是一个代数，但是由于 Lie 乘积的反对称性，使$[X+Y, X+Y]=0$，因而 Lie 代数是不可结合的代数.

定理 9.2.2 说明任何一个 r 维 Lie 群 G，它的 r 个无穷小算子$\{\hat{X}_i, i=1, 2, \cdots, r\}$或无穷小生成元$\{X_i, i=1, 2, \cdots, r\}$在定义交换关系为 Lie 乘积之下，构成一个 r 维 Lie 代数，这个 Lie 代数记为 g.

$$g = \{\alpha_i \hat{X}_i \mid \alpha_i \in \mathbf{R}\} \tag{9.2.68}$$

它是一个实数域上的实 Lie 代数，这个 Lie 代数 g 也可说是 Lie 群 G 在单位元邻域内线性化而得到的.

2. Lie 代数与 Lie 群

上面通过 Lie 氏三个定理说明任一 r 维 Lie 群 G 由它的无穷小算子可构成一个 Lie 代数 g. 反之，Lie 氏三个定理都存在相应的逆定理，对这些定理有兴趣的读者可参阅有关专著，比如 Gilmore. R 著“Lie Groups, Lie Algebras and Some of Their Applicatos”)，这里就不讨论了. 由这些逆定理可以得到任何一个 r 维实 Lie 代数 g 的 r 个线性无关的元素(即 Lie 代数的一组基矢)都可作为无穷小算子而对应一个局部 Lie 群. 不同基矢对应的局部 Lie 群是彼此同构的，也就是说在同构意义下任一 r 维 Lie 代数唯一地决定一个局部 Lie 群.

(9.2.3)式给出了 Lie 群 G 的无穷小元素 $g(\delta\boldsymbol{\alpha})$ 可由相应 Lie 代数的基矢$\{X_i, i=1, 2, \cdots, r\}$(即 G 的无穷小生成元)表示为

$$g(\delta\boldsymbol{\alpha}) = g(\mathbf{0}) + \sum_{i=1}^{r} \delta\alpha_i X_i = E + \sum_{i=1}^{r} \delta\alpha_i X_i$$

群的有限参数 $\boldsymbol{\alpha}$ 的元素 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 可由上式的极限得到，即令 $\delta\alpha_i = \frac{\alpha_i}{N}$, $N \to \infty$，于是

$$g(\boldsymbol{\alpha}) = \lim_{N\to\infty}\left[E + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{r}\alpha_i X_i\right]^N = \exp\left(\sum_{i=1}^{r}\alpha_i X_i\right) \tag{9.2.69}$$

即通过 Lie 代数无穷小元素 $\sum_{i=1}^{r}\alpha_i X_i$ 的指数映射可得到群的有限参数 $\boldsymbol{\alpha}$ 表示的元素.

如果单位元和无穷小生成元与 X_i 都是 $n \times n$ 的矩阵，矩阵的指数函数的定义为

$$\exp A = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} A^j, \quad A \text{为} n \times n \text{矩阵}, \quad A^0 = E \tag{9.2.70}$$

并且有下面一些性质：

（1）如果 A,B 都是 $n\times n$ 矩阵，而且若 B 是非奇异矩阵，则

$$\exp[BAB^{-1}] = B(\exp A)B^{-1} \tag{9.2.71}$$

（2）如果 $n\times n$ 矩阵 A,B 是可交换的，即 $[A,B]=0$，则

$$\exp(A+B) = (\exp A)(\exp B) \tag{9.2.72}$$

（3）矩阵指数函数 $\exp A$ 的行列式为

$$\det(\exp A) = \exp(\mathrm{tr} A) \tag{9.2.73}$$

（4）矩阵指数函数的复共轭为

$$(\exp M)^* = \exp(M^*) \tag{9.2.74}$$

（5）矩阵指数函数的转置为

$$(\widetilde{\exp M}) = \exp(\tilde{M}) \tag{9.2.75}$$

由这些结果可看到，如果无穷小生成元是反 Hermitian 矩阵，即 $X_i^+ = -X_i$，则群元素为酉矩阵，即

$$A = \exp\left(\sum_{i=1}^{r} \alpha_i X_i\right), \quad A^+ = \exp\left(-\sum_i \alpha_i X_i\right) = A^{-1}$$

若 X_i 为无迹反 Hermitian 矩阵，则群元素为单模酉群，即

$$\det A = \exp\left(\sum_{i=1}^{r} \alpha_i \mathrm{tr} X_i\right) = 1$$

若 X_i 为反对称矩阵，即 $\tilde{X}_i = -X_i$，则 A 为正交矩阵.

同一个实 Lie 代数可能对应几个 Lie 群，这些 Lie 群是局部同构的，即在单位元的邻域内是同构的，但是在整体性质上，却是不同的. 关于这一点，存在如下重要定理，即：

定理 9.2.4 若 g 为 n 维实 Lie 代数，存在一个单连通 Lie 群 SG 以 g 为它的 Lie 代数，在同构的意义下，这个单连通 Lie 群 SG 是唯一的. 其它以 g 为 Lie 代数的 Lie 群 G_1，$G_2,\cdots,G_r$ 都是复连通的，它们与 SG 同态.

这个定理说明，如果一个 n 维实 Lie 代数 g 以它的基矢为无穷小算子可给出若干个 Lie 群 G_1，G_2，$\cdots$，G_r. 这些 Lie 群彼此是局部同构的，而且其中只有一个是单连通 Lie 群 SG，其它都是复连通的，称 Lie 群 SG 为这些 Lie 群 G_i 的通用覆盖群(universal covering group)，SG 与其它 G_i 在整体上同态，而不同构.

9.3 Lie 代数的基本概念

在 9.2 节中已经给出了 Lie 代数的定义，为了进一步讨论 Lie 代数，在这节里对 Lie 代数中的一些基本概念进行说明.

1. Lie 代数中的基矢变换

在定义 9.2.1 中已指出定义在数域 K 上的 n 维 Lie 代数 g 是一个 n 维线性空间，因

而可选择 n 个元素为基矢 $\{X_1, X_2, \cdots, X_n\}$，它们间的 Lie 乘积为

$$[X_i, X_j] = C_{ij}^k X_k \tag{9.3.1}$$

g 中任一元素 X 和 Y 在这组基矢下可表示为

$$X = \lambda_i X_i, \quad Y = \mu_i X_i \tag{9.3.2}$$

于是

$$[X, Y] = [\lambda_i X_i, \mu_j X_j] = \lambda_i \mu_j [X_i, X_j] = \lambda_i \mu_j C_{ij}^k X_k \tag{9.3.3}$$

(注意在上述公式中重复脚标为求和).

如果选择另一组基矢

$$Y_i = a_{ij} X_j, \quad X_i = a_{ij}^{-1} Y_j \tag{9.3.4}$$

a_{ij}^{-1} 为变换矩阵 $A(a_{ij})$ 的逆矩阵 $A^{-1}(a_{ij}{}^{-1})$ 的矩阵元. 因而

$$[Y_i, Y_j] = a_{ik} a_{jl} [X_k, X_l] = a_{ik} a_{jl} C_{kl}^p X_p = a_{ik} a_{jl} C_{kl}^p a_{pq}^{-1} Y_q = C_{ij}'^q Y_q \tag{9.3.5}$$

即新的基矢 $\{Y_1, Y_2, \cdots, Y_n\}$ 的结构常数为

$$C_{ij}'^q = a_{ik} a_{jl} a_{pq}^{-1} C_{kl}^p \tag{9.3.6}$$

这表明不同基矢有不同的结构常数，一组基矢所决定的一组(n^3 个)结构常数与另一组基矢所决定的另一组结构常数之间的变换关系由这两种基矢间的变换矩阵所决定.

用 a_{qn} 乘以(9.3.6)式并对 q 求和，得到

$$a_{qn} C_{ij}'^q = a_{qn} a_{ik} a_{jl} a_{pq}^{-1} C_{kl}^p = a_{ik} a_{jl} C_{kl}^p \delta_{pn} \tag{9.3.7}$$

这个公式给出了两个基矢中两组结构常数 C_{ij}^k 与 $C_{pl}'^q$ 间的变换关系.

2. Lie 代数同构与同态

对于两个 Lie 代数 g_1 和 g_2，Lie 代数 g_1 的元素记为 X，Lie 代数 g_2 的元素记为 Y，如果两个 Lie 代数之间存在一个一一对应的映射，使它们中的元素 $X \longrightarrow Y$，而这种对应满足如下条件，即：

(1) 如果 $X_1 \longrightarrow Y_1$，$X_2 \longrightarrow Y_2$，则对数域 K 上的任何数 λ，$\mu \in K$，则 $\lambda X_1 + \mu X_2 \longrightarrow \lambda Y_1 + \mu Y_2$.

(2) 如果 $X_1 \longrightarrow Y_1$，$X_2 \longrightarrow Y_2$，则$[X_1, X_2] \longrightarrow [Y_1, Y_2]$称 Lie 代数 g_1 与 Lie 代数 g_2 同构，记为 $g_1 \approx g_2$.

任何 Lie 代数 g 都与它自己同构，称为自同构.

Lie 代数的基本问题之一是寻求互不同构的 Lie 代数.

显然两个同构的 Lie 代数，可以选择同构的基矢，即基矢 $\{X_1, X_2, \cdots, X_n\}$ 与 $\{Y_1, Y_2, \cdots, Y_n\}$ 同构，也就是 $X_i \longrightarrow Y_i$. 因而，它们有相同的结构常数，反之如果两个 Lie 代数有相同的结构常数，它们一定相互同构.

如果两个 Lie 代数 g_1 与 g_2 之间存在一个映射 φ，使得把 $X \in g_1$，映射为 $\varphi(X) = Y \in g_2$，即

$$X_1 \xrightarrow{\varphi} \varphi(X_1) \in g_2$$
$$X_2 \longrightarrow \varphi(X_2) \in g_2$$

而且

$$\lambda X_1 + \mu X_2 \xrightarrow{\varphi} \lambda \varphi(X_1) + \mu \varphi(X_2) \in g_2$$

则称 Lie 代数 g_1 与 Lie 代数 g_2 同态.

显然同构是一种特殊的同态，对于同构映射 φ 是一对一的映射.

Lie 代数的同构与同态与群的同构和同态是完全平行的定义，它们都要求映射下不仅建立了元素间的对应关系，而且对于群的乘法和 Lie 代数的 Lie 乘积也存在相应的对应关系.

3. 子代数的理想

子代数：设 h 是 Lie 代数 g 的一个线性子空间，如果 $H_1, H_2 \in h$，而且 $[H_1, H_2] \in h$，则称 h 为 g 的子代数，当然 h 也是一个 Lie 代数.

如果子代数 h 中任意两个元素 X, Y 的 Lie 乘积都为 0，即

$$[X, Y] = 0, \quad X, Y \in h$$

称子代数 h 为可交换的子代数，或称 Abel 子代数.

有一类子代数称为理想子代数，或简称理想(ideal)，是一非常重要的概念，下面给出它的定义.

定义 9.3.1(理想子代数)　如果 h 是 Lie 代数 g 的子代数，对于 g 中的任何元素 X $(X \in g)$ 与 h 中元素 $H(H \in h)$ 的 Lie 乘积，仍然是子代数 h 中的元素，即

$$[H, X] \in h, \quad X \in g, \ H \in h$$

则称这种子代数为理想子代数，简称理想.

理想是 Lie 代数 g 中的不变子代数，即 g 中任何元素与理想中元素的 Lie 乘积均为理想中的元素.

如果理想是可交换 Lie 代数，称为 Abel 理想.

4. Lie 代数的直和与半直和

假定 g_1 和 g_2 是 Lie 代数 g 的两个理想，而且

$$g = g_1 \cup g_2, \quad g_1 \cap g_2 = \varnothing$$

即 Lie 代数 g 为两个理想的并集，两个理想的交集是空集$\varnothing$，则称 Lie 代数 g 为 g_1 和 g_2 的直和，记为

$$g = g_1 \oplus g_2$$

如果两个子代数中 g_1 是理想，g_2 不是理想而是一般的子代数，即$[g_1, g_2] \subset g_1$，而且满足条件

$$g_1 \cup g_2 = g, \quad g_1 \cap g_2 = \psi$$

则称 Lie 代数 g 是 g_1 和 g_2 的半直和，记为

$$g = g_1 \oplus_s g_2$$

5. 陪集与商代数

定义 9.3.2(陪集)　如果 g 是 Lie 代数，h 是它的理想，对于 g 中的一个元素 $X \in g$，定义 $X + h = \overline{X}$，称 $\overline{X}$ 是 Lie 代数 g 的元素 X 的陪集，或者称 $\overline{X}$ 是 X 的 modh 同余类(congruence class).

$\overline{X}$ 是一个元素集合，即 $\overline{X} = \{X + H_1, X + H_2, \cdots, \}$，$H_1, H_2, \cdots, H_n$ 为理想的基矢.

如果 Lie 代数 g 是 n 维的，理想 h 是 m 维的，则不同的陪集只有 $n - m$ 个. 下面证明这一点.

假设 $\bar{X}$ 和 $\bar{Y}$ 是两个陪集，即

$$\bar{X}=X+h=\{X+H_1,\ X+H_2+,\ \cdots,\ X+H_n\}$$

$$\bar{Y}=Y+h=\{Y+H_1,\ Y+H_2+,\ \cdots,\ Y+H_n\}$$

如果 $\bar{X}$ 与 $\bar{Y}$ 之中有一个元素是相同的，比如

$$X+H_i=Y+H_j$$

于是

$$Y=X+H_i-H_j=X+H_k$$

即 Y 是陪集 $\bar{X}$ 中的一个元素，因而

$$\bar{Y}=X+H_i-H_j+h=X+h=\bar{X}$$

这表明如果 $\bar{X}$ 与 $\bar{Y}$ 的交集，$\bar{X}\cup\bar{Y}\neq\psi$，则 $\bar{X}=\bar{Y}$. 亦即陪集 $\bar{X}$ 与陪集 $\bar{Y}$ 或者 $\bar{X}\cup\bar{Y}=\psi$，或者 $\bar{X}=\bar{Y}$.

对于 n 维的 Lie 代数 g 和 m 维的理想 h 定义的陪集 $\bar{X}$，全部陪集的和集为 Lie 代数 g，即

$$\bigcup_i \bar{X}_i=g$$

由上面的讨论可看到对 Lie 代数通过加法运算由理想 h 定义的陪集 $\bar{X}=X+h$，与群 G 和不变子群 H 由乘法定义的陪集是完全相似的. 这也是仍然称 $\bar{X}$ 为陪集的原因，在代数中通常称 $\bar{X}$ 为 X 的 modh 同余类.

容易看到 $\bar{X}$ 与 $\bar{Y}$ 的 Lie 乘积为

$$[\bar{X},\ \bar{Y}]=[X+h,\ Y+h]=[X,\ Y]+h=[\overline{X,\ Y}]$$

由此关系可定义商代数.

定义 9.3.3(商代数)　若 n 维 Lie 代数 g，有一个 m 维的理想 h，则以陪集 $\bar{X}$ 为元素的集合仍然为线性空间，空间元素为陪集(或称为 modh 同集类)$\bar{X}$，若定义陪集 $\bar{X}$，$\bar{Y}$ 的 Lie 乘积为

$$[\bar{X},\ \bar{Y}]=[\overline{X,\ Y}]=[X,\ Y]+h$$

则这个空间 $\{\bar{X}\}$ 为一 Lie 代数，称为商代数，记为 g/h.

与群和商群的关系一样，Lie 代数 g 与商代数 g/h 同态，同态核为理想 h.

6. 单纯 Lie 代数和半单纯 Lie 代数

对 Lie 代数进行分类，其中单纯 Lie 代数和半单纯 Lie 代数是两类重要的 Lie 代数. 下面给出它们的定义.

定义 9.3.4(单纯 Lie 代数)　如果 Lie 代数 g 除了它自身和由元素 $\varnothing$ 构成的两个平庸理想外，不再有其它非平庸理想，则称 g 为单纯 Lie 代数(simple Lie algebra)或简称单 Lie 代数，或者说没有非平庸理想的 Lie 代数是单 Lie 代数.

定义 9.3.5(半单纯 Lie 代数)　Lie 代数 g 如果除了 $\varnothing$ 这个平庸理想外，不存在其它 Abel 理想(即可交换理想)，则称为半单纯 Lie 代数(semisimple Lie algebra)，或简称半单 Lie 代数.

显然两个单 Lie 代数的直和(Lie 代数 $g=g_1\oplus g_2$)是半单 Lie 代数，因为 g_1 和 g_2 是 g 的理想，而且 g_1，g_2 都是单 Lie 代数，即都不含有其它理想，当然更没有 Abel 理想，因而 g 含有两个理想 g_1，g_2，但不含 Abel 理想.

关于半单 Lie 代数存在一个定理，即 Lie 代数 g 是半单 Lie 代数的充分必要条件是:g 可以写为它的理想 g_1, g_2, …, g_m 的直和，即

$$g = \sum_{i=1}^{m} \oplus g_i$$

而且 g_1, g_2, …, g_m 都是单 Lie 代数.

容易看到 1 维单 Lie 代数 g 不是半单 Lie 代数，因为 1 维 Lie 代数 g 本身是它的理想，而且是 Abel 理想，因而 1 维单 Lie 代数不是半单 Lie.代数. 除此之外，所有单 Lie 代数都是半单 Lie 代数. 因为 Abel Lie 代数不是单 Lie 代数，故任何单 Lie 代数除了它自身和∅外，不存在其它理想，当然也不存在 Abel 理想，然而它自身却是它的一个理想，但这个理想(即 Lie 代数本身)却不是 Abel 理想. 因此，符合半单 Lie 代数除了∅之外不存在 Abel 理想的定义.

因此如果除去 1 维单 Lie 代数之外，半单 Lie 代数也包括了单 Lie 代数.

单和半单 Lie 代数的概念也可引入群的概念之中.

对于一个群 G，如果它不包括除自身和单位元构成的两个平庸不变子群外，不包括其它不变子群则称 G 为单纯群;如果它除了单位元构成的平庸不变子群外，不包括其它 Abel 不变子群，则称 G 为半单纯群. 把这两个概念引入 Lie 群，容易看到单 Lie 群 G 的 Lie 代数 g 是单 Lie 代数，半单 Lie 群 G 的 Lie 代数 g 是半单 Lie 代数，反之实的单(或半单)Lie 代数 g 对应的连通 Lie 群 G 也是单(或半单)的 Lie 群.

7. 可解 Lie 代数与幂零 Lie 代数

Lie 代数中除单和半单两类 Lie 代数之外，可解 Lie 代数和幂零 Lie 代数是另外两类重要 Lie 代数，下面讨论它们的定义.

如果 h_1, h_2 是 Lie 代数 g 的两个理想，则 $[h_1, h_2]$ 也是 g 的理想. 下面对此进行证明.

令 $X \in g$, $K \in h_1$, $L \in h_2$，当然 K, $L \in g$，由 Jacobi 恒等式

$$[[X, K], L] + [[K, L], X] + [[L, X], K] = 0$$

利用

$$[[K, L], X] = -[X, [K, L]], \quad [[L, X], K] = [K, [X, L]]$$

得到

$$\begin{aligned}[X, [K, L]] &= [[X, K], L] + [[L, X], K] \\ &= [[X, K], L] + [K, [X, L]]\end{aligned}$$

由于 h_1, h_2 都是理想，因而 $[X, K] \in h_1$, $[X, L] \in h_2$，而且 $[[X, K], L] \in h_1$, $[K, [X, L]] \in h_2$，因而

$$[X, [K, L]] \in [h_1, h_2]$$

从而证明了 $[h_1, h_2]$ 为理想.

由此可得到 Lie 代数 g 的两个理想链.

1° Lie 代数 g 的导来链与可解 Lie 代数

定义如下的子 Lie 代数链为导来链(derived series):

$$g^{(0)} \supset g^{(1)} \supset g^{(2)} \supset \cdots \tag{9.3.8}$$

其中

$$g^0=g,\ g^{(1)}=[g^0,\ g^0],\ g^{(2)}=[g^1,\ g^1],\ \cdots \tag{9.3.9}$$

由定义可看到 $g^{(0)}$，$g^{(1)}$，$g^{(2)}$，…，都是 Lie 代数 g 的理想. $g^{(0)}$ 是 g 本身也是它的最大理想，前面对 $[h_1,\ h_2]$ 是 g 的理想的证明，当然适用于 $h_1=h_2=g$. 因而 $g^{(1)}$，$g^{(2)}$，…都是理想.

由导来链(9.3.8)可定义可解 Lie 代数.

定义 9.3.6(可解 Lie 代数)　若 Lie 代数 g 的导来链(9.3.8)在自然数 k 处，使

$$g^{(k)}=\{0\}$$

则称 Lie 代数 g 为可解 Lie 代数(solvable Lie a algebra).

由此定义可看到可解 Lie 代数不包括任何半单 Lie 代数. 因为半单 Lie 代数没有 $\{0\}$ 之外的 Abel 理想，导来链(9.3.8)不可能出现 $g^{(k)}=\{0\}$. 因为只有 Abel 理想才能使 $[h,\ h]=0$，h 为 Abel 理想.

容易证明，可解 Lie 代数的子代数是可解 Lie 代数，可解 Lie 代数的同态象(如果 Lie 代数 g 同态于 Lie 代数 g'，称 g' 为 g 的同态象)是可解 Lie 代数，可解 Lie 代数的直和是可解 Lie 代数. 如果 Lie 代数 g 和理想 h 的商代数 g/h 是可解的，而 h 也是可解的，则 g 是可解的.

2° 降中心链和幂零 Lie 代数

Lie 代数 g 的另一个理想链为

$$g^{[0]}\supset g^{[1]}\supset g^{[2]}\supset\cdots \tag{9.3.10}$$

其中

$$\begin{cases} g^{[0]}=g \\ g^{[1]}=[g,\ g] \\ g^{[2]}=[g,\ g^{[1]}] \\ g^{[3]}=[g,\ g^{[2]}] \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \end{cases} \tag{9.3.11}$$

称为降中心链(ascending central series). 显然 $g^{[k]}$ 为理想，由它可定义幂零 Lie 代数.

定义 9.3.7(幂零 Lie 代数)　Lie 代数 g 的降中心链(9.3.10)中，若

$$g^{[k]}=\{0\}$$

则称 Lie 代数 g 是幂零 Lie 代数(nilpotent Lie algebra).

与可解 Lie 代数不包括半单 Lie 代数相同的原因，幂零 Lie 代数也不包括任何半单 Lie 代数. 而且幂零 Lie 代数一定是可解 Lie 代数.

幂零 Lie 代数也有如下性质，即:幂零 Lie 代数的子代数也是幂零的，幂零 Lie 代数的同态象是幂零的，幂零 Lie 代数的直和是幂零的.

可以证明一切可解 Lie 代数 g 都可表示为一个可解 Lie 代数与一个半单 Lie 代数的半直和，即

$$g=l\oplus_s p$$

其中 l 是可解 Lie 代数，p 是半单 Lie 代数，而 l 又可写为一个可解 Lie 代数与半单 Lie 代数的半直和，因而一切可解 Lie 代数都可表示为若干半单 Lie 代数的半直和.

而前边已经指出，任何一个半单 Lie 代数都可表示为单 Lie 代数的直和. 因而研究单 Lie 代数对于研究所有 Lie 代数都具有重要意义.

实际上 Cartan 和 Killing 在理论上已给出了全部单 Lie 代数，它们已包括 A_n，($n\geqslant 1$)；B_n，($n\geqslant 1$)；C_n，($n\geqslant 2$)和 D_n($n\geqslant 3$)四大类的典型 Lie 代数和 5 个例外 Lie 代数 G_2，F_4，E_6，E_7 和 E_8. 后面将对这些单 Lie 代数进行仔细研究.

9.4 复半单 Lie 代数的 Cartan 形式

上节中已指出 Lie 代数可分为可解 Lie 代数与半单 Lie 代数(可解 Lie 代数包括了幂零 Lie 代数，因为一切幂零 Lie 代数都是可解 Lie 代数，半单 Lie 代数包括了除了 1 维 Lie 代数之外的所有单 Lie 代数). 而一切可解 Lie 代数又可写为另一个可解 Lie 代数与一个半单 Lie 代数的半直和. 因而研究半单 Lie 代数在 Lie 代数理论中是十分重要的. 而对半单 Lie 代数 g 进行 Cartan 分解可反映半单 Lie 代数的最基本性质，本节就来讨论这一问题.

9.4.1 Cartan-Weyl 基，Cartan 子代数与半单 Lie 代数的 Cartan 形式

1. Lie 代数 g 上的内导子

对 Lie 代数 g 引入一种运算称为内部求导，简称内导子，用符号 ad 表示，比如对 Lie 代数的任一元素 X 进行内导运算，则记为 $\mathrm{ad}(X)$，称对元素 X 的内部求导运算 $\mathrm{ad}(X)$ 为元素 X 的内导子(inner derivation). 内导子 $\mathrm{ad}(X)$ 为空间 g 中的线性变换，定义为

$$\mathrm{ad}(X)Y=[X,\ Y],\quad X,\ Y\in g \tag{9.4.1}$$

容易得到

$$\begin{aligned}\mathrm{ad}(X)[Y,\ Z] &=[\mathrm{ad}(X)Y,\ Z]+[Y,\ \mathrm{ad}(X)Z]\\ &=[[X,\ Y],\ Z]+[Y,\ [X,\ Z]]\end{aligned} \tag{9.4.2}$$

2. Cartan 子代数与 Lie 代数的 Cartan 形式

设 n 维 Lie 代数 g 的基矢为$\{X_1,\ X_2,\ \cdots,\ X_n\}$，$X$ 是 g 中的任一元素，则 $X=x_\nu X_\nu$，用 g 中某一元素 $A=a_\mu X_\mu$ 的内导子建立如下的本征方程，即令

$$\mathrm{ad}(A)X=[A,\ X]=\rho X \tag{9.4.3}$$

代入 X，A 的表示，(9.4.3)式变为

$$a_\mu x_\nu[X_\mu,\ X_\nu]=a_\mu x_\nu C^\tau_{\mu,\nu}X_\tau=\rho x_\tau X_\tau$$

其中 $C^\tau_{\mu,\nu}$为结构常数. 由上式可得到

$$[a_\mu C^\tau_{\mu,\nu}x_\nu-\rho x_\tau\delta_{\tau\nu}]X_\tau=0$$

由于基矢是线性无关的，由上式可得到

$$(a_\mu C^\tau_{\mu,\nu}-\rho\delta_{\tau\nu})x_\nu=0 \tag{9.4.4}$$

这是关于 x_ν 的线性齐次方程组，根据线性齐次方程组具有非零解的条件，要求(9.4.4)式的系数行列式为零，即

$$\det|a_\mu C^\tau_{\mu,\nu}-\rho\delta_{\tau\nu}|=0 \tag{9.4.5}$$

这是关于本征值 ρ 的 n 次方程，称为久期方程. 对于复 Lie 代数 g，ρ 在复数域上有 n 个

解，每个解称为 Lie 代数 g 的一个根(root)，n 个根中存在重根，因而实际不同根的数目比 n 少. 方程(9.4.5)的根 $\boldsymbol{\rho}$ 随着 A 的选择而不同，因而可选择 A，使方程(9.4.5)的重根最少，也就是使方程(9.4.5)具有最多数目的不同的根.

Cartan 证明了对于半单 Lie 代数 g，本征方程(9.4.5)只有 $\boldsymbol{\rho}=\mathbf{0}$ 的根是重根，而其它根都是单根. $\boldsymbol{\rho}=\mathbf{0}$ 的根的退化度(或称简并度) r 是复半单 Lie 代数 g 的一个特征量，称为 Lie 代数的秩(rank).

当 $\boldsymbol{\rho}=\mathbf{0}$ 时，方程(9.4.3)变为

$$[A, X]=0 \tag{9.4.6}$$

它的根 $\boldsymbol{\rho}=\mathbf{0}$ 是 r 度的重根，因而由(9.4.4)式求出 r 个根为 $\mathbf{0}$ 的本征矢量 X，记为 H_1，H_2，…，H_r，这些 H_i 满足方程

$$\mathrm{ad}(A)H_i=[A, H_i]=0 \quad (\boldsymbol{\rho}=\mathbf{0}) \tag{9.4.7}$$

它们是相互线性无关的，因而构成 Lie 代数 g 的 r 维子空间，也是 g 的一个 r 维交换子代数，称为 Cartan 子代数，记为 h_c. 这个子空间的任一元素可写为

$$X=\lambda_i H_i$$

因而 h_c 为

$$h_c=\{X=\lambda_i H_i \mid \lambda_i\in\mathbf{C}\}$$

本征方程(9.4.3)(亦即(9.4.5))其它($n-r$)个根(亦即本征值)为 $\boldsymbol{\rho}=\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}$, …. 这些根(本征值)对于一定的 A 是完全一定的. 全部 $h-r$ 个非零根 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}$, …称为半单 Lie 代数 g 的根系，记 Σ. 对应于根 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}$, …的本征矢量 E_α, E_β, E_γ, …. 它们满足方程(9.4.3)，为

$$\mathrm{ad}(A)E_\alpha=[A, E_\alpha]=\boldsymbol{\alpha}E_\alpha$$

这 $n-r$ 个本征矢量作为基矢构成 g 的一个子空间 $\bar{h}$，$g=h_c\cup\bar{h}$，$\bar{h}\cap h_c=\varnothing$.

容易得到

$$\mathrm{ad}(A)[H_i, E_\alpha]=\boldsymbol{\alpha}[H_i, E_\alpha] \tag{9.4.8}$$

这说明 $[H_i, E_\alpha]$ 也是本征方程(9.4.3)的根(或本征值) $\boldsymbol{\alpha}$ 的本征矢量. 由于对半单 Lie 代数 g 非零根 $\boldsymbol{\alpha}$ 是单根，本征矢量 E_α 是非简并的，因而同一本征值 $\boldsymbol{\alpha}$ 的本征矢量只能差一个常数，因而

$$[H_i, E_\alpha]=\alpha_i E_\alpha \tag{9.4.9}$$

在(9.4.8)式中代入 $A=\lambda_i H_i$ 可得到

$$\mathrm{ad}(A)E_\alpha=[A, E_\alpha]=\lambda_i[H_i, E_\alpha]=\lambda_i\alpha_i E_\alpha=\boldsymbol{\alpha}E_\alpha$$

因而

$$\boldsymbol{\alpha}=\lambda_i\alpha_i \tag{9.4.10}$$

对于根为 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 的两个本征矢量 E_α 和 E_β，容易计算出

$$\mathrm{ad}(A)[E_\alpha, E_\beta]=(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})[E_\alpha, E_\beta] \tag{9.4.11}$$

这说明如果 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 是一个根，前面已指出 $n-r$ 个非零根 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}$, …是完全确定的，因而 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 是不是根也是完全确定的. 当 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 是根，则 $[E_\alpha, E_\beta]$ 是根为 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 的本征矢量；如果 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 不是根，则不存在与 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 对应的本征矢量.

对于半单 Lie 代数可以证明若 $\boldsymbol{\alpha}$ 是非零根，则 $(-\boldsymbol{\alpha})$ 也是它的根，因而由(9.4.11)

式得到$[E_\alpha, E_{-\alpha}]$是$\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{0}$的本征矢量，本征值为0的本征矢量只是$H_i(i=1, 2, \cdots, r)$的线性组合.

这样从上述对(9.4.9)式和(9.4.11)式的分析得到

$$\begin{cases}[H_i, E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha \\ [E_\alpha, E_\beta] = N_{\alpha\beta}E_{\alpha+\beta}, \quad 当\ \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\ 是根 \\ [E_\alpha, E_\beta] = 0, \quad 当\ \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\ 不是根 \\ [E_\alpha, E_{-\alpha}] = C^i_{\alpha,-\alpha}H_i\end{cases} \tag{9.4.12}$$

这便是在基矢$\{H_1, H_2, \cdots, H_r; E_\alpha, E_\beta, E_\gamma, \cdots\}$之下的半单 Lie 代数$g$的标准 Lie 代数，称这套基为 C-W 基，称(9.4.12)式表示的 Lie 代数为 Cartan 标准形式，或称为半单 Lie 代数g的正则形式. 一般称r个基$H_1, H_2, \cdots, H_r$为 Cartan 矢量或 Cartan 算子，$E_\alpha, E_\beta, E_\gamma, \cdots$为根矢量或根算子.

在这种基下，结构常数为

$$\begin{cases}C^\gamma_{i\alpha} = \delta_{\alpha\gamma}\alpha_i \\ C^\tau_{\alpha\beta} = \begin{cases}0, & 若\ \boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta},\ 不是根 \\ N_{\alpha\beta}, & 若\ \boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\neq\mathbf{0},\ 是根\end{cases} \\ C^k_{ij} = 0 \\ C^i_{\alpha,-\alpha} \neq 0\end{cases} \tag{9.4.13}$$

其中脚标$i, j, k, \cdots$表示 Cartan 子代数基H_i的下标，$\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}, \cdots$为根算子的脚标.

3. 根空间与根系

半单 Lie 代数g的任一非零根$\boldsymbol{\alpha}$都是r维空间的向量，称这个r维空间为根空间，它是r维 Cartan 子代数的对偶空间. $[H_i, E_\alpha]=\alpha_i E_\alpha(i=1, 2, \cdots, r)$中的$\alpha_i$是$r$维根向量$\boldsymbol{\alpha}$的第$i$个分量. 前已指出$n$维 Lie 代数的$(n-r)$个根向量的集合$\{\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}, \cdots\}$称为根系，记为$\Sigma$.

9.4.2 Cartan-Killing 度规张量与半单 Lie 代数的判别定理

1. Cartan-Killing 度规张量

设$\{X_1, X_2, \cdots, X_n\}$为 Lie 代数$g$的一组基矢，它们的结构常数为$\{C^\tau_{\sigma\rho}\}$，即

$$\mathrm{ad}(X_\sigma)X_\rho = [X_\sigma, X_\rho] = C^\tau_{\sigma\rho}X_\tau$$

这可视为内导子$\mathrm{ad}(X_\sigma)$在基矢$\{X_1, X_2, \cdots, X_n\}$下的表示矩阵的矩阵元为结构常数$C^\tau_{\sigma\rho}$，因而可定义 Cartan-Killing 度规张量(metric tensor)(简记 C-K 度规张量)为

$$g_{\sigma\lambda} = g_{\lambda\sigma} = \mathrm{tr}(\mathrm{ad}(X_\sigma)\mathrm{ad}(X_\lambda)) = C^\tau_{\sigma\rho}C^\rho_{\lambda\tau} \tag{9.4.14}$$

也可写为

$$(X_\sigma, X_\lambda) = \mathrm{tr}(\mathrm{ad}(X_\sigma)\mathrm{ad}(X_\lambda)) \tag{9.4.15}$$

称为 Cartan 内积(注意对重复脚标求和). C-K 度规张量也称 Killing 型. 由结构常数的反对称性立即可看出

$$g_{\lambda\sigma} = g_{\sigma\lambda}$$

2. 半单 Lie 代数的判别定理

利用 C-K 度规张量可以给出 Lie 代数的判别条件，即如下定理.

定理 9.4.1　Lie 代数 g 是半单 Lie 代数的充要条件是 C-K 度规张量是非退化的，即

$$\det|g_{\sigma\lambda}|\neq 0 \tag{9.4.16}$$

证明　下面证明必要性，即如果 C-K 度规张量是非退化的，则 g 为半单 Lie 代数.

设 Lie 代数 g 存在一个可交换的理想 a，选取 $A\in a$，对任意 X 和 $Y(X, Y\in g)$ 有

$$(\mathrm{ad}A\ \mathrm{ad}X)^2Y=[A, [X, [A, [X, Y]]]]$$

由于 $A\in a$ 是理想，因而 $[A, [X, Y]]\in a$，而 a 又是可交换理想，于是上式为 0，即

$$(\mathrm{ad}A\ \mathrm{ad}X)^2Y=0$$

Y 是 g 中任意向量，因而 $\mathrm{ad}A\ \mathrm{ad}X=0$，按定义 9.4.14 即元素 A 和 X 的 Cartan 内积为 0，也就是它们的 C-K 度规张量为 0，即

$$g_{AX}=\mathrm{tr}(\mathrm{ad}(A)\ \mathrm{ad}(X))=0$$

如果 C-K 度规张量是非退化的，只有元素 $A=0$，因而 a 为空集合. 于是 Lie 代数 g 为半单 Lie 代数(不存在交换子代数).

对于定理的充分性只做部分证明.

设 C-K 度规张量是退化的，令 g 内集合 h 为

$$h=\{X|X\in g, Y\in g, (X, Y)=\mathrm{tr}(\mathrm{ad}(X)\ \mathrm{ad}(Y))=0\}$$

即集合 h 内的一切元素 X 都使 g 的任一元素 Y 的 Cartan 内积为 0，即

$$(X, Y)=\mathrm{trad}(X)\ \mathrm{ad}(Y)=0$$

由于 C-K 度规张量是退化的，因而 $h\neq\{0\}$. 取子集 h 中一个元素 X，取 g 中一元素 A，则 Cartan 内积

$$([A, X], Y)=-(X, [A, Y])=0$$

因而 h 为 g 的理想. 以 $(X, Y)_h$ 代表理想 h 的 C-K 度规张量，则由定义

$$(X, Y)_h=(X, Y)=0$$

因而

$$(X, X)=0,\quad X\in h$$

可以说明 $(X, X)=0$ 的 Lie 代数 g 是可解 Lie 代数，因而不是半单 Lie 代数，从而说明如果 g 是半单 Lie 代数，C-K 度规一定是非退化的.

在定理证明过程中由对集合 h 中的一切元素 X 都存在 $(X, X)=0$，得出结论 g 是可解 Lie 代数，是引用了可解 Lie 代数的判别定理. 下面不加证明地给出这条定理.

定理 9.4.2(可解 Lie 代数的判别定理)　Lie 代数是可解 Lie 代数的充要条件是

$$(X, X)=\mathrm{tr}(\mathrm{ad}(X)\ \mathrm{ad}(X))=0,\ X\in g \tag{9.4.17}$$

也就是说，如果 Lie 代数任何元素 X 的 Cartan 内积为 $(X, X)=0$ 是 Lie 代数 g 可解的充要条件.

3. 半单 Lie 代数在归一化 C-W 基下的度规张量

利用半单 Lie 代数在 C-W 基下的结构常数(9.4.13)，由(9.4.14)式可得到半单 Lie 代数 g 的 C-K 度规张量为

$$\begin{cases} g_{\alpha\tau} = \sum\limits_{\rho\beta} C^{\beta}_{\alpha\rho} C^{\rho}_{\tau\beta} = C^{\alpha}_{\alpha i} C^{i}_{\tau\alpha} + C^{i}_{\alpha,\,-\alpha} C^{-\alpha}_{\tau i} + \sum\limits_{\alpha+\beta\neq 0} C^{\alpha+\beta}_{\alpha\beta} C^{\beta}_{\tau,\,\alpha+\beta} \\ g_{ij} = \sum\limits_{\alpha\beta} C^{\beta}_{i\alpha} C^{\gamma}_{j\beta} = \sum\limits_{\alpha} \alpha_i \alpha_j \\ g_{i\alpha} = g_{\alpha i} = \sum\limits_{\beta\gamma} C^{\gamma}_{i\beta} C^{\beta}_{\alpha\gamma} = 0 \end{cases} \tag{9.4.18}$$

注意到 $C^{\alpha}_{\alpha,\,i} = -\alpha_i$，$C^{i}_{\tau,\,\alpha} = \delta_{\tau,\,-\alpha} C^{i}_{\tau,\,-\tau}$，$C^{\alpha+\beta}_{\alpha,\,\beta} = N_{\alpha,\,\beta}$，$C^{\beta}_{\tau,\,\alpha+\beta} = \delta_{\tau,\,-\alpha} N_{\tau,\,\alpha+\beta}$可得到

$$g_{\alpha\tau} = \delta_{\tau,\,-\alpha} g_{\alpha,\,-\alpha} = \alpha_i C^{i}_{\alpha,\,-\alpha} + N_{\alpha,\,\beta} N_{-\alpha,\,\alpha+\beta} = (E_{\alpha},\, E_{-\alpha}) \tag{9.4.19}$$

由此看到，如果半单 Lie 代数 g 包括根 $\boldsymbol{\alpha}$，则 $-\boldsymbol{\alpha}$ 也一定是根，否则若 $-\boldsymbol{\alpha}$不是根，则由(9.4.19)式可看到

$$g_{\alpha,\,-\alpha} = 0$$

因而度规

$$\det|g| = \det|g_{ij}|\det|g_{\alpha\tau}| = 0$$

根据定理9.4.1说明 g 不是半单的，因而证明了半单 Lie 代数如果 $\boldsymbol{\alpha}$ 是根，$-\boldsymbol{\alpha}$ 也一定是根.

由此得到半单 Lie 代数在 C-W 基矢中 C-K 度规张量为

$$\hat{g} = \begin{array}{c|cccccccccc} & 1,\ 2,\ 3,\ \cdots,\ r, & \alpha, & -\alpha, & \beta, & -\beta, & \cdots, & \gamma, & -\gamma \\ \hline 1,\ 2,\ 3,\ \vdots,\ r & g_{ij} & & & & & & & \\ \alpha & & 0 & g_{\alpha-\alpha} & & & & & \\ -\alpha & & g_{\alpha-\alpha} & 0 & & & & & \\ \beta & & & & 0 & g_{\beta-\beta} & & & \\ -\beta & & & & g_{\beta-\beta} & 0 & & & \\ \vdots & & & & & & \ddots & & \\ \gamma & & & & & & & 0 & g_{\gamma-\gamma} \\ -\gamma & & & & & & & g_{\gamma-\gamma} & 0 \end{array} \tag{9.4.20}$$

其中

$$g_{ij} = \sum_{\alpha} \alpha_i \alpha_j$$

为根向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 的 i, j 分量之积对根向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 在根系 Σ 中求和. 而

$$\begin{aligned} g_{\alpha,\,-\alpha} &= C^{\alpha}_{\alpha i} C^{i}_{-\alpha,\,\alpha} + C^{\alpha+\beta}_{\alpha\beta} C^{\beta}_{-\alpha,\,\alpha+\beta} \\ &= \alpha_i C^{i}_{-\alpha,\,\alpha} + N_{\alpha,\,\beta} N_{-\alpha,\,\alpha+\beta} = (E_{\alpha},\, E_{-\alpha}) \end{aligned}$$

对基矢进行归一化，使 Cartan 内积

$$(E_{\alpha},\, E_{-\alpha}) = \mathrm{tr}(\mathrm{ad}(E_{\alpha})\mathrm{ad}(E_{-\alpha})) = g_{\alpha,\,-\alpha} = 1$$

于是得到了归一化 C-W 基下的度规张量为

$$\begin{pmatrix} g_{ij} & \vdots & & & & & & \\ \cdots & \vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & \vdots & 0 & 1 & & & & \\ & \vdots & 1 & 0 & & & & \\ & \vdots & & & 0 & 1 & & \\ & \vdots & & & 1 & 0 & & \\ & \vdots & & & & & \ddots & \\ & \vdots & & & & & 0 & 1 \\ & \vdots & & & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{9.4.21}$$

而且 $\det|\hat{g}| = \det|g_{ij}|$.

4. *结构常数 $C^i_{\alpha,-\alpha}$的几何性质及其与 $C^\alpha_{i\alpha}$的关系*

结构常数 $C^i_{\alpha,-\alpha}$在根空间中有明确的几何意义，与 $C^\alpha_{i\alpha}=\alpha_i$ 有密切关系. 为了看到这一点，进行如下讨论.

由(9.4.18)式中

$$g_{ij} = \sum_\alpha \alpha_i\alpha_j$$

可看到它符合由 r 个根 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}, \cdots$荷载的根空间的度规张量的一般定义，因而张量 g_{ij}是根空间的度规张量.

由度规张量 $g_{\alpha\beta}$定义如下的三个脚标的张量，即

$$C_{\alpha\beta\gamma} = g_{\alpha\lambda}C^\lambda_{\beta\gamma} = C^\tau_{\alpha\rho}C^\rho_{\lambda\tau}C^\lambda_{\beta\gamma} \tag{9.4.22}$$

由 Jacobi 恒等式

$$C^\lambda_{\beta\gamma}C^\rho_{\tau\lambda} + C^\lambda_{\gamma\tau}C^\rho_{\beta\lambda} + C^\lambda_{\tau\beta}C^\rho_{\gamma\lambda} = 0$$

得到

$$-C^\lambda_{\beta\gamma}C^\rho_{\tau\lambda} = C^\lambda_{\beta\gamma}C^\rho_{\lambda\tau} = C^\lambda_{\gamma\tau}C^\rho_{\beta\lambda} + C^\lambda_{\tau\beta}C^\rho_{\gamma\lambda}$$

于是三脚标张量为

$$C_{\alpha\beta\gamma} = C^\tau_{\alpha\rho}C^\lambda_{\gamma\tau}C^\rho_{\beta\lambda} + C^\tau_{\alpha\rho}C^\lambda_{\tau\beta}C^\rho_{\gamma\lambda} \tag{9.4.22'}$$

由结构常数的反对称性，(9.4.22′)定义的 $C_{\alpha\beta\gamma}$是对交换脚标的反对称张量，即

$$C_{\alpha\beta\gamma} = -C_{\beta\alpha\gamma} = -C_{\alpha\gamma\beta} = -C_{\gamma\beta\alpha}$$

令 g^{ij}是 g_{ij}的逆张量，即

$$g^{ij}g_{jl} = \delta_{il} \quad (\det|g_{ij}|\neq 0，因而存在逆)$$

于是利用反对称张量 $C_{k\alpha-\alpha}$可把 $C^i_{\alpha,-\alpha}$写为

$$C^i_{\alpha,-\alpha} = g^{ik}g_{kl}C^l_{\alpha,-\alpha} = g^{ik}C_{k,\alpha,-\alpha} = g^{ik}C_{-\alpha,k,\alpha} = g^{ik}g_{-\alpha,\beta}C^\beta_{k\alpha}$$

由于 $g_{-\alpha,\beta}=g_{-\beta,\alpha}=g_{\alpha,\beta}$，因而上式为

$$C^i_{\alpha,-\alpha} = g^{ik}C^\alpha_{k\alpha} = g^{ik}\alpha_k \tag{9.4.23}$$

由于 g^{ik}是根空间度规张量 g_{ik}的逆，因而

$$C^i_{\alpha,-\alpha} = g^{ik}\alpha_k = \alpha^i \tag{9.4.24}$$

α^i 为根 α 的逆变分量.

有了这些关系在 C-W 基中，半单 Lie 代数 g 的标准 Lie 代数(9.4.12)变为

$$\begin{cases}[H_i, H_j] = 0 \\ [H_i, E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha \\ [E_\alpha, E_\beta] = \begin{cases}0, & 若\ \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\ 不是根 \\ N_{\alpha\beta}E_{\alpha+\beta}, & 若\ \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\ 不是根，而且\ \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\neq 0\end{cases} \\ [E_\alpha, E_{-\alpha}] = \alpha^i H_i\end{cases} \tag{9.4.25}$$

其中 α_i 和 α^i 分别为根向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 的第 i 个分量和第 i 逆变分量. 由此可定义根向量的内积为

$$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_i \boldsymbol{\alpha}^i \boldsymbol{\beta}_i = \boldsymbol{\alpha}^i \boldsymbol{\beta}_i$$

9.5 半单 Lie 代数根的性质与根系

根的性质对复半单 Lie 代数很重要，根系则是半单 Lie 代数的重要标志. 通过对所有可能的根系的研究，可以找到全部可能的复半单 Lie 代数，即 A_n, B_n, C_n, D_n 和 5 个例外 Lie 代数 G_1, F_4, E_6, E_7 与 E_8.

9.5.1 半单 Lie 代数根的性质

1. 关于根的三条定理

关于半单 Lie 代数的根，存在以下三个定理.

定理 9.5.1 若 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\gamma}$ 是半单 Lie 代数 g 的非零根，它们的内积为 $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\gamma}) = \alpha^i\gamma_i$，则 $\frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\gamma})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}$ 是整数，而且 $\boldsymbol{\gamma} - \frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\gamma})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}\boldsymbol{\alpha}$ 也是 g 的根.

证明 设 $\boldsymbol{\gamma}$, $\boldsymbol{\alpha}$ 是根，则

$$[E_{-\alpha}, E_\gamma] = N_{-\alpha,\gamma}E_{\gamma-\alpha} = E'_{\gamma-\alpha}$$

在上式中为了符号简单不考虑 E_α 的归一性，令 $E'_{\gamma-\alpha} = N_{-\alpha,\gamma}E_{\gamma-\alpha}$，于是

$$\begin{cases}[E_{-\alpha}, E'_{\gamma-\alpha}] = E'_{\gamma-2\alpha} \\ [E_{-\alpha}, E'_{\gamma-2\alpha}] = E_{\gamma-3\alpha} \\ \cdots\cdots \\ [E_{-\alpha}, E'_{\gamma-l\alpha}] = E'_{\gamma-(l+1)\alpha}\end{cases} \tag{9.5.1}$$

由于根只有 $(n-r)$ 个，因而(9.5.1)式一定到某一个 j 值，比如记这个 j 为 p 就终止了，即

$$[E_{-\alpha}, E'_{\gamma-p\alpha}] = E'_{\gamma-(p+1)\alpha} = 0$$

若对于根 $\boldsymbol{\gamma}$, $\boldsymbol{\gamma}+\boldsymbol{\alpha}$ 不是根，只存在关于 $\boldsymbol{\gamma}$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$ 的根链

$$\boldsymbol{\gamma}-\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\gamma}-2\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\gamma}-3\boldsymbol{\alpha},\ \cdots,\ \boldsymbol{\gamma}-p\boldsymbol{\alpha}$$

称为含有根 $\boldsymbol{\gamma}$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$ 根链.

我们取 E_α 与 $E'_{\gamma-l\alpha}$ 的 Lie 乘积，$l=1, 2, \cdots, p-1$，得到

$$[E_\alpha, E'_{\gamma-(l+1)\alpha}] = \mu_{l+1}E_{\gamma-l\alpha}$$

代入 $E'_{\gamma-(l+1)\alpha} = [E_\alpha, E'_{\gamma-l\alpha}]$，上式为

$$[E_\alpha, [E_{-\alpha}, E'_{\gamma-l\alpha}]] = \mu_{l+1} E'_{\gamma-l\alpha}$$

利用 Jacobi 恒等式得到

$$\begin{aligned}\mu_{l+1} E'_{\gamma-l\alpha} &= -[E'_{\gamma-l\alpha}, [E_\alpha, -E_{-\alpha}]] - [E_{-\alpha}, [E_{\gamma-l\alpha}, E_\alpha]] \\ &= [E_{\gamma-l\alpha}, \alpha^i H_i] + \mu_l [E_{-\alpha}, E'_{\gamma-(l-1)\alpha}] \\ &= \alpha^i (\gamma - l\alpha)_i E'_{\gamma-l\alpha} + \mu_l E'_{\gamma-l\alpha} \\ &= [(\alpha, \gamma) - l(\alpha, \alpha) + \mu_l] E'_{\gamma-l\alpha}\end{aligned}$$

由此得到

$$\mu_{l+1} - \mu_l = (\alpha, \gamma) - l(\alpha, \alpha) \tag{9.5.2}$$

这是关于 μ_l 的递推公式，因为 $\gamma+\alpha$ 不是根，相应的 $E'_{\gamma+\alpha}=0$，因而

$$[E_\alpha, E'_{\gamma+\alpha}] = \mu_0 E'_{\gamma+2\alpha} = 0$$

即 $\mu_0=0$，利用这个初始条件，可由(9.5.2)式解出

$$\mu_l = l(\alpha, \gamma) - \frac{l(l-1)}{2}(\alpha, \alpha),\ l \geqslant 0 \tag{9.5.3}$$

而 $\mu_{p+1}=0$，因而由(9.5.3)式得到

$$(\alpha, \gamma) = \frac{p(\alpha, \alpha)}{2},\ p = \frac{2(\alpha, \gamma)}{(\alpha, \alpha)} \tag{9.5.4}$$

$$\mu_l = l(p+1-l)\frac{(\alpha, \alpha)}{2} \tag{9.5.5}$$

这就证明了 $\dfrac{2(\alpha, \gamma)}{(\alpha, \alpha)} = p$ 是整数，而且

$$\gamma - \frac{2(\alpha, \gamma)}{(\alpha, \alpha)}\alpha = \gamma - p\alpha$$

是含 γ 的 α 根链

$$\gamma, \gamma-\alpha, \gamma-2\alpha, \cdots, \gamma-p\alpha$$

中最后的一个根，这就是证明了此定理.

为了进一步讨论含 γ 的 α 根链，令含 γ 的根链为

$$\gamma+q\alpha, \gamma+(q-1)\alpha, \cdots, \gamma+\alpha, \gamma, \gamma-\alpha, \gamma-2\alpha, \cdots, \gamma-p\alpha$$

对此根链只须在上面讨论中令 $\gamma=\beta+q\alpha$ 就得到根链

$$\beta+q\alpha, \beta+(q-1)\alpha, \cdots, \beta, \beta-\alpha, \beta-2\alpha, \beta-(p-q)\alpha = \beta-m\alpha$$

亦即 $\gamma, \gamma-\alpha, \gamma-2\alpha, \cdots, \gamma-p\alpha$. 因此(9.5.4)式变为

$$\frac{2(\alpha, \gamma)}{(\alpha, \alpha)} = p, \quad \frac{2(\alpha, \beta)}{(\alpha, \alpha)} = p-m \tag{9.5.6}$$

(9.5.5)式变为

$$\mu_l = q(m+1)\frac{(\alpha, \alpha)}{2} \tag{9.5.7}$$

其中 q 和 m 由根链

$$\beta+q\alpha, \beta+(q-1)\alpha, \cdots, \beta, \beta-\alpha, \beta-2\alpha, \cdots, \beta-m\alpha$$

决定，$p=q+m$.

定理 9.5.2 若 $\boldsymbol{\alpha}$ 是半单 Lie 代数 g 的非零根，则由 $\boldsymbol{\alpha}$ 构成的根链中只有 $-\boldsymbol{\alpha}$，$-\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{0}$，$-\boldsymbol{\alpha}+2\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}$ 是根.

证明 任何矢量 E_α 与它自身的 Lie 乘积均为 0，即 $[E_\alpha, E_\alpha]=0$，因而 $2\boldsymbol{\alpha}$ 不是根，($[E_\alpha,E_\alpha]=E_{2\alpha}'$).

在定理 9.5.1 中令 $\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\alpha}$，则(9.5.4)式给出的 P 为

$$P=\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}=2$$

因此根链只有 $-\boldsymbol{\alpha}$，$-\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{0}$，$-\boldsymbol{\alpha}+2\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}$ 这 3 个根.

定理 9.5.3 若 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$ 是半单 Lie 代数 g 的两个非零根，则含有 $\boldsymbol{\beta}$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$ 根链，

$$\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}+2\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}+3\boldsymbol{\alpha}, \cdots$$

最多只能有 4 个根，即 $\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}$ 只能存在如下的数值:

$$\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \pm3$$

证明 定理 9.5.2 已给出，当 $\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\alpha}$ 时，只有 3 个根(包括零根)符合此定理. 令 $\boldsymbol{\beta}\neq\boldsymbol{\alpha}$，此时假定含 $\boldsymbol{\beta}$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$ 的根链有 5 个根，它们是 $\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}+2\boldsymbol{\alpha}$，因为 $\boldsymbol{\beta}+2\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}=2\boldsymbol{\alpha}$，$\boldsymbol{\beta}+2\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}=2(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})$，都不是根，因此含 $\boldsymbol{\beta}+2\boldsymbol{\alpha}$ 的 $\boldsymbol{\beta}$ 根链仅有一个根 $\boldsymbol{\beta}+2\boldsymbol{\alpha}$，所以内积 $(\boldsymbol{\beta}+2\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=0$. 因为含 $\boldsymbol{\beta}$ 的 $\boldsymbol{\beta}+2\boldsymbol{\alpha}$ 根链只有 $\boldsymbol{\beta}+2\boldsymbol{\alpha}$ 一个根，$m=p=0$. 同样，$\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$ 和 $\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 都不是根. 因此含 $\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha}$ 的 $\boldsymbol{\beta}$ 根链也只有一个根 $\boldsymbol{\beta}$-$2\boldsymbol{\alpha}$，于是内积 $(\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})=0$. 上述两个内积相加，得到 $(\boldsymbol{\beta}+2\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})+(\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})=2(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})=0$，即 $\boldsymbol{\beta}$ 为零根，这与 $\boldsymbol{\beta}$ 是非零根的假定相矛盾，因而证明了含 $\boldsymbol{\beta}$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$ 根系最多只能有 4 个，不能有 5 个根.

因为含 $\boldsymbol{\beta}$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$ 根链最多只能有 4 个根，(9.5.4)式中的 $p\leqslant3$，即

$$\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \pm3$$

这个关系对说明 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 间的几何关系是十分重要的.

向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 间的夹角 φ 为

$$\cos^2\varphi=\frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})^2}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}$$

定理 9.5.1 说明 $\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}$ (包括 $\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}$) 是整数，定理 9.5.3 说明 $\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}$ 只能为 0，±1，±2，±3. 因而根向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 的夹角余弦的平方只能为

$$\cos^2\varphi=\frac{1}{4}\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}=\frac{1}{4},\ \frac{2}{4},\ \frac{3}{4},\ 1$$

这说明根间夹角只能为 30°, 45°, 60°, 90°, 180°.

下面概括一下三个定理所揭示的根的性质:

(1) 若 $\boldsymbol{\alpha}$ 是根，则 $-\boldsymbol{\alpha}$ 也是根

(2) $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$ 是根，则 $\boldsymbol{\beta}-\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}\boldsymbol{\alpha}$ 也是根，从而可得到含 $\boldsymbol{\beta}$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$ 根链 $\boldsymbol{\beta}+l\boldsymbol{\alpha}, \cdots, \boldsymbol{\beta}$,

$\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$, …, $\boldsymbol{\beta}-m\boldsymbol{\alpha}$, 但是这个根链最多只有四个根.

(3) 两根 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ 间夹角 $\varphi(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ 只能 30°, 45°, 60°, 90°, 180°.

2. 结构常数 $N_{\alpha\beta}$

结构常数 $N_{\alpha\beta}$ 为

$$[E_\alpha, E_\beta] = N_{\alpha\beta} E_{\alpha+\beta}$$

容易得到

$$[E_\alpha, [E_{-\alpha}, E_{\alpha+\beta}]] = N_{-\alpha, \alpha+\beta}[E_\alpha, E_\beta] = N_{-\alpha, \alpha+\beta} N_{\alpha+\beta} E_{\alpha+\beta}$$

而

$$[E_\beta, E_\alpha] = N_{\beta, \alpha} E_{\alpha+\beta} = -[E_\alpha, E_\beta] = -N_{\alpha, \beta} E_{\alpha+\beta}$$

因此

$$N_{\alpha, \beta} = -N_{\beta, \alpha}$$

另一方面

$$[E_{-\alpha}, E_{-\beta}] = N_{-\alpha, -\beta} E_{-(\alpha+\beta)}$$

$N_{\alpha, \beta}$ 和 $N_{-\alpha, -\beta}$ 只能差一个相因子, 因而可规定 $N_{\alpha, \beta} = -N_{-\alpha, -\beta}$.

为了具体计算出 $N_{\alpha, \beta}$, 在对根链 $\boldsymbol{\gamma}$, $\boldsymbol{\gamma}-\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\gamma}-2\boldsymbol{\alpha}$, …, $\boldsymbol{\gamma}-p\boldsymbol{\alpha}$ 计算中曾得到

$$[E_\alpha, E'_{\gamma-l\alpha}] = \mu_l E'_{\gamma-(l-1)\alpha}$$

令 $\boldsymbol{\gamma}-(l-1)\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}-l\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\beta}$, 于是得到

$$\boldsymbol{\mu}_l = N_{\alpha\beta} N_{-\alpha, \alpha+\beta}$$

代入(9.5.7)式得到

$$N_{\alpha\beta} N_{-\alpha, \alpha+\beta} = q(m+1)\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}{2} \tag{9.5.8}$$

其中 q 和 m 由含 $\boldsymbol{\beta}$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$ 根链 $\boldsymbol{\beta}+q\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}+(q-1)\boldsymbol{\alpha}$, …, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$, …, $\boldsymbol{\beta}-m\boldsymbol{\alpha}$ 决定.

可以证明当 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}$ 都是非零根, 而且 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\gamma}=\mathbf{0}$, 此时 $N_{\alpha\beta}=N_{\beta\gamma}=N_{\gamma\alpha}$(证明见万哲先著《李代数》), 由此得到

$$N_{-\alpha, -\beta} = N_{\alpha+\beta, -\alpha} - N_{-\alpha, \alpha+\beta}$$

即

$$N_{\alpha, \beta} = N_{-\alpha, \alpha+\beta}$$

于是由(8.5.7)式得到

$$N_{\alpha, \beta} = [q(m+1)\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}{2}]^{1/2} \tag{9.5.9}$$

这样我们便给出了归一化 C-W 基下半单 Lie 代数 g 的正则形式(9.4.25)式中的全部结构常数.

9.5.2　半单 Lie 代数的根系 Σ 与 σ 系

1. σ 系

n 维半单 Lie 代数 g, 有 $(n-r)$ 个非零根, 称为 Lie 代数 g 的根系, 记为 Σ, 它们构成 r-维根空间中的 $(n-r)$ 个向量. 上节已证明这些向量具有如下性质, 即

(1) 如果向量 $\boldsymbol{\alpha}\in\Sigma$, 则 $-\boldsymbol{\alpha}\in\Sigma$; 当 $k\neq1$ 时, $k\boldsymbol{\alpha}\notin\Sigma$.

(2) 如果$\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \Sigma$, $\boldsymbol{\alpha} \neq \boldsymbol{\beta}$, 而且$\boldsymbol{\beta}+k\boldsymbol{\alpha} \in \Sigma$, 其中$-p \leqslant k \leqslant q$, 即$\Sigma$中包括含$\boldsymbol{\beta}$的$\boldsymbol{\alpha}$根链;$\boldsymbol{\beta}+q\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}+(q-1)\boldsymbol{\alpha}$, …, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha}$, …, $\boldsymbol{\beta}-p\boldsymbol{\alpha}$, 则

$$2\frac{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=p-q$$

具有这种性质的非零向量集合Σ称为σ系，因此半单 Lie 代数的根系Σ为σ系.

对于属于σ系的向量集合，可一般地证明具有如下性质:

(1) σ系中向量是有限的.

(2) 若向量集合Σ是一个σ系，若$\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \Sigma$, 则

$$\boldsymbol{\beta}-\frac{2(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}\boldsymbol{\alpha} \in \Sigma$$

(3) 若Σ是σ系，$\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \Sigma$, $\boldsymbol{\alpha} \neq \boldsymbol{\beta}$, 而且$\boldsymbol{\beta}+k\boldsymbol{\alpha} \in \Sigma$, $(-p \leqslant k \leqslant q)$, 则$\boldsymbol{\beta}+l\boldsymbol{\alpha} \notin \Sigma$, $l>q$, $l<-p$.

(4) 若Σ是σ系，$\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \Sigma$, $\boldsymbol{\alpha} \neq \pm\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\alpha}$与$\boldsymbol{\beta}$间的夹角为$\varphi(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$, 则

$$\cos\varphi(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})=\frac{\varepsilon}{2}\sqrt{l}, \quad \varepsilon=\pm 1, \quad l=0, 1, 2, 3$$

如果$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}) \leqslant (\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})$, 则当$l \neq 0$时,

$$\frac{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=l, \quad \frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=\varepsilon l, \quad \frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=\varepsilon$$

当$l=0$时,

$$\frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=\frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=0$$

定理 9.5.1，定理 9.5.2，定理 9.5.3 证明了半单 Lie 代数的根系是σ系.

根据σ系的性质或定理 9.5.3 所得结果的推论，半单 Lie 代数g的相邻非零根之间的夹角只能是0°, 30°, 45°, 60°和 90°. 下面分别讨论这几种情况下两个根$\boldsymbol{\alpha}$和$\boldsymbol{\beta}$的关系.

(1) 若$\varphi(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})=0°$, 则只能$\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\beta}$, 显然$\boldsymbol{\alpha}=2\boldsymbol{\beta}$或$\boldsymbol{\beta}=2\boldsymbol{\alpha}$都不是根.

(2) 若$\varphi(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})=30°$, 此时

$$\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=\frac{1}{2}\text{或}\frac{3}{2}; \quad \frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=\frac{3}{2}\text{或}\frac{1}{2}$$

$$\frac{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=\frac{1}{3}\text{或}3\text{, 根长比为}\sqrt{3}$$

(3) 若$\varphi(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})=45°$, 此时

$$\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=\frac{1}{2}\text{或}1; \quad \frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=1\text{或}\frac{1}{2}$$

$$\frac{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=\frac{1}{2}\text{或}2\text{, 根长比为}\sqrt{2}$$

(4) 若$\varphi(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})=60°$, 此时

$$\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=\frac{1}{2}; \quad \frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=\frac{1}{2}$$

$$\frac{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}=1\text{，根长比为 }1$$

（5）若 $\varphi(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=90°$，此时

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=0;\quad \frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}\text{不定，根长比任意}$$

下面给出两个向量集合 S 和 S' 相似和合同的定义.

若 S 和 S' 是 Euclid 空间的向量集合，如果能在向量集合 S 与 S' 之间建立向量的一一对应关系，即

$$S\ni\boldsymbol{\alpha}\longrightarrow f(\boldsymbol{\alpha})\in S'$$

而且内积

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=(f(\boldsymbol{\alpha}),f(\boldsymbol{\beta}))\text{，对一切 }\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in S$$

则称向量集合 S 与 S' 合同.

如果这种对应关系使它们的内积之间满足关系

$$(f(\boldsymbol{\alpha}),f(\boldsymbol{\beta}))=k^2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\text{，对一切 }\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in S$$

则称集合 S 与 S' 相似，k 是正实数，称为相似系数.

对 σ 系向量集合，可以证明两个集合 Σ 与 Σ' 如果相似，则它们一定合同.

为了从根系上判断两个半单 Lie 代数是否同构，不加证明地给出如下定理.

定理 9.5.4　设 g 和 g' 是两个半单 Lie 代数，Σ 和 Σ' 分别为它们的根系，如果 Σ 与 Σ' 相似，则 Lie 代数 g 与 g' 同构.

根据这个定理，就只须研究根系不相似的互不同构的半单 Lie 代数了.

如果一个 σ 系向量集合 Σ，其中存在一个非空子集 Σ'，而且这个子集也满足 σ 系的两个性质，则称这个子集为非空子 σ 系，不存在非空子 σ 系的向量集合称为单 σ 系.

利用 σ 子集和单 σ 系的概念，可给出一个关于 Lie 代数的重要定理.

定理 9.5.5　设 g 是半单 Lie 代数，h 是它的 Cartan 子代数，Σ 是 g 的相应于 h 的根系. 设 Σ 可分解为两个正交的 σ 子集 Σ_1，Σ_2（$\Sigma_1\cup\Sigma_2=\Sigma$），则 Lie 代数相应地分解成两个理想 g_1 和 g_2 的直和，h 也相应地分解成 g_1 的 Cartan 子代数 h_1 和 g_2 的 Cartan 子代数 h_2 的直和，Σ_i 是子代数 g_i 的根系.

由这个定理可得到一个重要推论，即

推论　半单 Lie 代数 g 为单 Lie 代数的充要条件，是 g 的根系 Σ 为单 σ 系.

容易看到单 σ 系的一个重要特征是只能包括两种或两种以下不同长度的根.

这个定理和推论为研究单 Lie 代数的根系提供了依据.

对这些定理有兴趣的读者可参阅万哲先著《李代数》.

9.6　单 Lie 代数与根图

单 Lie 代数的根系为单 σ 系，单 σ 系中间向量最多只有两种不同的长度. 根据这两点可由对根系的研究找到全部单 Lie 代数，即四个系列的典型 Lie 代数和 5 个例外 Lie 代数.

9.6.1 秩 $r\leqslant 2$ 的单 Lie 代数

本节研究秩 r 为 1 和 2 的单 Lie 代数. 在这种情况下根空间为 1 维和 2 维，可用一条直线或 2 维平面来描述它们的根图.

1. 秩为 1 的单 Lie 代数

这种 Lie 代数 Cartan 子代数是 1 秩的，即只有一个 Cartan 矢量 H. 根是 1 维向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $-\boldsymbol{\alpha}$，因而它的代数结构为

$$\begin{cases}[H, E_{\alpha}] = \boldsymbol{\alpha}E_{\alpha} \\ [H, E_{-\alpha}] = -\boldsymbol{\alpha}E_{-\alpha} \\ [E_{\alpha}, E_{-\alpha}] = \boldsymbol{\alpha}H\end{cases} \qquad (9.6.1)$$

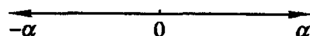


图 9.6.1 1 秩 Lie 代数的根图

1 维向量的分量和它的逆变分量都是 $\boldsymbol{\alpha}$，它们的根图如图 9.6.1 所示. 这个 Lie 代数称为典型 Lie 代数 A_1，它所对应的 Lie 群为 $SU(2)$ 和 $SO(3)$（$SU(2)$ 与 $SO(3)$ 局部同构）. Lie 代数和对应的 Lie 群问题将在第十一章进行讨论.

2. 秩为 2 的单 Lie 代数

秩为 2 的单 Lie 代数，它们的根构成平面上的图形，这种单 σ 系的根图只能有两种长度的根. 因而有多少种这种根图就相应地有多少种单 Lie 代数，下面按两种根 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 的夹角为 30°, 45°, 60°和 90°四种情况进行研究.

1° 夹角为 30°的根图

取长为 1 的根 $\boldsymbol{\beta}$ 在 X 轴上，端点坐标为(1, 0)，由于这种情况下，根长比为$\sqrt{3}$，然后取长为$\sqrt{3}$的根 $\boldsymbol{\alpha}$，它与 $\boldsymbol{\beta}$ 的夹角为 30°，它的端点坐标为$(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$，于是$(-\boldsymbol{\beta})$和$(-\boldsymbol{\alpha})$也是根. 因为

$$\frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=1, \quad \boldsymbol{\beta}-\frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$$

所以 $\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$ 是根，其端点坐标为$(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$；$\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$ 也是根，端点坐标为$(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$. 因为$(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})=\eta$，不符合根长比为$\sqrt{3}$的要求，因而 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 不是根. 由于$\frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=3$，因而含 $\boldsymbol{\alpha}$ 的 $\boldsymbol{\beta}$ 根链为 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\alpha}-2\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\alpha}-3\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\alpha}-2\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\alpha}-3\boldsymbol{\beta}$ 都是根. 另外

$$(\boldsymbol{\alpha}-3\boldsymbol{\beta})+\frac{2(\boldsymbol{\alpha}-3\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}\boldsymbol{\beta}=2\boldsymbol{\alpha}-3\boldsymbol{\beta}$$

说明 $2\boldsymbol{\alpha}-3\boldsymbol{\beta}$ 也是根. 这样最后得到了 12 个根，把它们画在图 9.6.2 中，是一个对称性很高的 David 图. 这个 Lie 代数是 5 个例外 Lie 代数之一，称为 G_2，它所对应 Lie 群也记为 G_2. Racah 在研究包括 f 电子的复杂原子光谱理论时，首次使用了 Lie 群 G_2. 表 9.6.1 给出了 Lie 代数 G_2 的 12 个非零根.

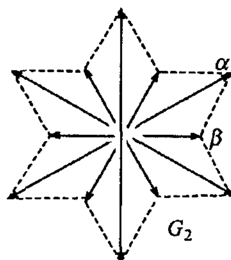


图 9.6.2 Lie 代数 G_2 的根图

表 9.6.1　Lie 代数 G_2 的 12 个非零根

根	坐标	根	坐标
$\boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{\beta}$	$(1,0)$	$-\boldsymbol{\alpha}_1$	$(-1,0)$
$\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}$	$(\frac{3}{2},\frac{\sqrt{3}}{2})$	$-\boldsymbol{\alpha}_2$	$(-\frac{3}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2})$
$\boldsymbol{\alpha}_3=\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$	$(\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2})$	$-\boldsymbol{\alpha}_3$	$(-\frac{1}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2})$
$\boldsymbol{\alpha}_4=2\boldsymbol{\alpha}-3\boldsymbol{\beta}$	$(0,\sqrt{3})$	$-\boldsymbol{\alpha}_4$	$(0,-\sqrt{3})$
$\boldsymbol{\alpha}_5=\boldsymbol{\alpha}-2\boldsymbol{\beta}$	$(-\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2})$	$-\boldsymbol{\alpha}_5$	$(\frac{1}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2})$
$\boldsymbol{\alpha}_6=\boldsymbol{\alpha}-3\boldsymbol{\beta}$	$(-\frac{3}{2},\frac{\sqrt{3}}{2})$	$-\boldsymbol{\alpha}_6$	$(\frac{3}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2})$

两个 Cartan 基矢记为 $H_1=H_x$，$H_2=H_y$，12 个根基矢（或根算子）为 $E_{\pm\alpha_i}(i=1,2,\cdots,6)$. 假定它们为归一化 C-W 基 E_{α_i} 与 $E_{-\alpha_i}$ 的 Cartan 内积为 1，即

$$(E_{\alpha_i},E_{-\alpha_i})=\mathrm{tr}(\mathrm{ad}(E_{-\alpha_i})\mathrm{ad}(E_{-\alpha_i}))=1$$

因而标准 Lie 代数为

$$[H_1,H_2]=0$$
$$[H_1,E_{\alpha_i}]=(\boldsymbol{\alpha}_i)_x E_{\alpha_i}$$
$$[H_2,E_{\alpha_i}]=(\boldsymbol{\alpha}_i)_y E_{\alpha_i}$$
$$[E_{\alpha_i},E_{-\alpha_i}]=(\boldsymbol{\alpha}_i)^x H_1+(\boldsymbol{\alpha}_i)^y H_2,\quad (\boldsymbol{\alpha}_i)^x=(\boldsymbol{\alpha}_i)_x,\ (\boldsymbol{\alpha}_i)^y=(\boldsymbol{\alpha}_i)_y$$
$$[E_{\alpha_i},E_{\alpha_j}]=\begin{cases}0, & \boldsymbol{\alpha}_i+\boldsymbol{\alpha}_j\notin\Sigma\\ N_{\alpha_i,\alpha_j}E_{(\alpha_i+\alpha_j)}, & \boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j\in\Sigma\end{cases}$$

利用表 9.6.1 中根的 x 和 y 分量以及(9.5.9)式可得到 Lie 代数 G_2 的具体部分标准代数结构：

$$[H_1,E_{\pm\alpha_1}]=\pm E_{\pm\alpha_1},\qquad [H_2,E_{\pm\alpha_1}]=0$$
$$[H_1,E_{\pm\alpha_2}]=\pm\frac{3}{2}E_{\pm\alpha_2},\qquad [H_2,E_{\pm\alpha_2}]=\pm\frac{\sqrt{3}}{2}E_{\pm\alpha_2}$$
$$[H_1,E_{\pm\alpha_3}]=\pm\frac{1}{2}E_{\pm\alpha_3},\qquad [H_2,E_{\pm\alpha_2}]=\pm\frac{\sqrt{3}}{2}E_{\pm\alpha_3}$$
$$[H_1,E_{\pm\alpha_4}]=0,\qquad [H_2,E_{\pm\alpha_4}]=\pm\frac{\sqrt{3}}{2}E_{\pm\alpha_4}$$
$$[H_1,E_{\pm\alpha_5}]=\mp\frac{1}{2}E_{\pm\alpha_5},\qquad [H_2,E_{\pm\alpha_5}]=\pm\frac{\sqrt{3}}{2}E_{\pm\alpha_5}$$
$$[H_1,E_{\pm\alpha_6}]=\mp\frac{3}{2}E_{\pm\alpha_6},\qquad [H_2,E_{\pm\alpha_6}]=\pm\frac{\sqrt{3}}{2}E_{\pm\alpha_6}$$
$$[E_{\alpha_1},E_{-\alpha_1}]=H_1,\qquad [E_{\alpha_2},E_{-\alpha_2}]=\frac{3}{2}H_1+\frac{\sqrt{3}}{2}H_2$$
$$[E_{\alpha_3},E_{-\alpha_3}]=\frac{1}{2}H_1+\frac{\sqrt{3}}{2}H_2,\qquad [E_{\alpha_4},E_{-\alpha_4}]=\sqrt{3}H_2$$

$$[E_{\alpha_5}, E_{-\alpha_5}] = -\frac{1}{2}H_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}H_2, \quad [E_{\alpha_6}, E_{-\alpha_6}] = -\frac{3}{2}H_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}H_2$$

$$[E_{\alpha_1}, E_{\alpha_2}] = 0, \quad [E_{\alpha_1}, E_{-\alpha_2}] = N_{\alpha_1, -\alpha_2}E_{-\alpha_3}$$

$$[E_{\alpha_1}, E_{\alpha_3}] = N_{\alpha_1, \alpha_3}E_{\alpha_2}, \quad [E_{\alpha_1}, E_{-\alpha_3}] = N_{\alpha_1, -\alpha_3}E_{-\alpha_5}$$

$$[E_{\alpha_1}, E_{\alpha_4}] = 0, \quad [E_{\alpha_1}, E_{-\alpha_4}] = 0$$

$$[E_{\alpha_1}, E_{\alpha_5}] = N_{\alpha_1, \alpha_5}E_{\alpha_3}, \quad [E_{\alpha_1}, E_{-\alpha_5}] = N_{\alpha_1, -\alpha_5}E_{-\alpha_6}$$

$$[E_{\alpha_1}, E_{\alpha_6}] = N_{\alpha_1, \alpha_6}E_{\alpha_5}, \quad [E_{\alpha_1}, E_{-\alpha_6}] = 0$$

其它$[E_{\alpha_i}, E_{\alpha_j}]$也可同样求出，$[E_{\alpha_i}, E_{\alpha_j}]=0$，说明$\boldsymbol{\alpha}_i+\boldsymbol{\alpha}_j$不是根，其中$N_{\alpha_i, \alpha_j}$可按(9.5.9)式，由含$\boldsymbol{\alpha}_i$的$\boldsymbol{\alpha}_j$根链计算. 比如$N_{\alpha_1, -\alpha_2}=N_{\beta, -\alpha}$，含$-\boldsymbol{\alpha}$的$\boldsymbol{\beta}$根链为$-\boldsymbol{\alpha}+3\boldsymbol{\beta}$，$-\boldsymbol{\alpha}+2\boldsymbol{\beta}$，$-\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$. 因而由(9.5.9)式得到$N_{\beta, \alpha}=\left[\frac{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}{2}\right]^{1/2}=\sqrt{\frac{3}{2}}$.

并可计算 Lie 代数 G_2 的 C-K 度规张量为

$$g_{ij} = \sum_{\alpha} \boldsymbol{\alpha}_i \boldsymbol{\alpha}_j, \quad g_{11} = 12, \; g_{22} = 12, \; g_{12} = g_{21} = 0$$

因而度规张量为

$$\hat{g}(G_2) = \begin{pmatrix} 12 & 0 & & & & & & & & & & & & \\ 0 & 12 & & & & & & & & & & & & \\ & & 0 & 1 & & & & & & & & & & \\ & & 1 & 0 & & & & & & & & & & \\ & & & & 0 & 1 & & & & & & & & \\ & & & & 1 & 0 & & & & & & & & \\ & & & & & & 0 & 1 & & & & & & \\ & & & & & & 1 & 0 & & & & & & \\ & & & & & & & & 0 & 1 & & & & \\ & & & & & & & & 1 & 0 & & & & \\ & & & & & & & & & & 0 & 1 & & \\ & & & & & & & & & & 1 & 0 & & \end{pmatrix}$$

可计算出

$$\det|g(G_2)| = 12^2 = 144 \neq 0$$

2° 夹角 45°的根图

在这种情况下根长比为$\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=2$或$\frac{1}{2}$；$\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=2$或$\frac{1}{2}$.

(1) $\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=2$；$\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=1$

此时$\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$都是根，取$\boldsymbol{\alpha}$在$x$轴上坐标为(1, 0)，$\boldsymbol{\beta}$与$\boldsymbol{\alpha}$夹角为45°，长为$\sqrt{2}$. 因而坐标为(1, 1)，当然$-\boldsymbol{\alpha}$，$-\boldsymbol{\beta}$也是根，而且

$$\boldsymbol{\beta} - \frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{\alpha}$$

也是根，坐标为(−1, 1). 含$\boldsymbol{\beta}$的$\boldsymbol{\alpha}$根链应当为$\boldsymbol{\beta}$，$\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$，$\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha}$. 因而$\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$也是根，

它的坐标为(0, 1). 而 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 不是根，因为它若是根，含($\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$)的根链将有 5 个根，这违背定理 9. 5. 3，由此这个 Lie 代数有 8 个根：

$$\pm\boldsymbol{\alpha}(\pm 1, 0), \quad \pm\boldsymbol{\beta}(\pm 1, \pm 1),$$
$$\pm(\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha})(0, \pm 1), \quad \pm(\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha})(\mp 1, \pm 1)$$

这 8 个根对称地分布在一个正方形之内，图 9. 6. 3 给出了这种根图. 这是典型 Lie 代数 B_2，对应的 Lie 群为 $SO(5)$.

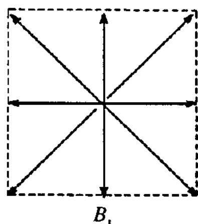


图 9. 6. 3　Lie 代数 B_2 的根图

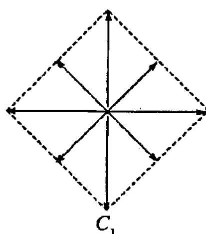


图 9. 6. 4　Lie 代数 C_2 的根图

(2) $\dfrac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=\dfrac{1}{2}$; $\dfrac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=1$

通过相似的分析也可得到 8 个根，把这种根图画于图 9. 6. 4 中. 这个根图对应的 Lie 代数为 C_2，相应的 Lie 群为 $Sp(4)$.

显然 B_2 的根图与 C_2 的根图是相似的，因而 Lie 代数 B_2 与 C_2 同构.

3° 夹角为 60°的情况

在这种情况下($\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}$) = ($\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta}$)，所有根具有相同长度，而

$$\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=\frac{1}{2}$$

因而若 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ 是根，$-\boldsymbol{\alpha}$，$-\boldsymbol{\beta}$ 也是根，而且

$$\boldsymbol{\beta}-\frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$$

也是根. 因而得另外两个根 $\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$ 和 $-(\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha})=\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$，而 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 不是根，因为($\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$) =3($\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}$). 这种由 6 个根 $\pm\boldsymbol{\alpha}$，$\pm\boldsymbol{\beta}$，$\pm(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})$ 构成的根图，画在图 9. 6. 5 中，它为典型 Lie 代数 A_2，相应的 Lie 群为 $SU(3)$.

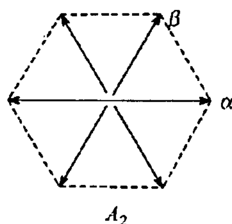


图 9. 6. 5　Lie 代数 A_2 的根图

4° 夹角为 90°的情况

当根 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 夹角为 90°时，

$$\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}=\frac{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}=0$$

根长比不确定. 取($\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}$) = ($\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta}$)，只有 4 个根，即 $\pm\boldsymbol{\alpha}$，$\pm\boldsymbol{\beta}$(因为 $\boldsymbol{\beta}-\dfrac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\beta}$).

它们的根图如图 9. 6. 5 所示. 这个 Lie 代数为 D_2，显然这 4 个根可分为两个子 σ 系，即 $\Sigma_1=\{\boldsymbol{\alpha}, -\boldsymbol{\alpha}\}$，$\Sigma_2=\{\boldsymbol{\beta}, -\boldsymbol{\beta}\}$，$\Sigma=\Sigma_1\cup\Sigma_2$，这表明 D_2 不是单 Lie 代数，而是两个 Lie 代数 A_1 的直和，即

$$D_2 = A_1 \oplus A_1$$

在所对应的 Lie 群为 $SO(4)$，这个群也是两个 $SO(3)$ 群的直和，即

$$SO(4) = SO(3) \oplus SO(3)$$

对应 $r \leqslant 2$ 的 Lie 代数一共为 6 个，其中单 Lie 代数有 5 个，即 A_1（1 秩），G_2，B_2，C_2，D_2，而 $B_2 \approx C_2$. 半单 Lie 代数有一个，即 $D_2 = A_1 \oplus A_1$.

9.6.2 秩 $r>2$ 的单 Lie 代数

1. 典型 Lie 代数 A_n，B_n，C_n，D_n

秩 $r>2$ 时，已不能用平面上的根图表示它们了，利用下面一节中讨论的 Dynkin 图可很好地分析它们. 在这一节只对这些秩 >2 的 Lie 代数做些简要的讨论.

1° 典型 Lie 代数 B_n

由 B_2 的根图（图 9.6.6）可看到它的根由相互垂直的两个根 $\boldsymbol{e}_1 = (1, 0)$（在上节中记 $\boldsymbol{\alpha}$）和 $\boldsymbol{e}_2 = (0, 1)$（在上节中记 $\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\alpha}$）及 $-\boldsymbol{e}_1$，$-\boldsymbol{e}_2$，以及 $(\pm \boldsymbol{e}_1 \pm \boldsymbol{e}_2)$ 构成.

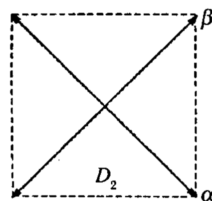


图 9.6.6 Lie 代数 D_2 的根图

把这种根的结构推广到维数为 $n(n>2)$ 的根空间，可定义 n 个相互垂直的根，即

$$\boldsymbol{e}_1 = (1, 0, 0, \cdots, 0)$$
$$\boldsymbol{e}_2 = (0, 1, 0, \cdots, 0)$$
$$\cdots\cdots$$
$$\boldsymbol{e}_{n-1} = (0, 0, 0, \cdots, 1, 0)$$
$$\boldsymbol{e}_n = (0, 0, 0, \cdots, 0, 1)$$

由它们可构成 $2n^2$ 个非零根.

$$\pm \boldsymbol{e}_i, \quad \pm \boldsymbol{e}_i \pm \boldsymbol{e}_j \quad (i \neq j)$$

再加上 n 个 0 根，在 n 维根空间共有 $n(2n+1)$ 个根，这种根系构成的 Lie 代数为 $n(2n+1)$ 维的 n 秩的典型 Lie 代数 $B_n(n \geqslant 2)$.

2° 典型 Lie 代数 B_n

Lie 代数 C_2 的根图坐标可表示为 $\boldsymbol{\alpha} = (2, 0)$，$\boldsymbol{\beta} = (1, 1)$，因而对于向量

$$\boldsymbol{e}_1 = (1, 0), \ \boldsymbol{e}_2 = (0, 1)$$

则

$$\boldsymbol{\alpha} = 2\boldsymbol{e}_1, \ \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$$

Lie 代数 C_2 的 8 个非零根可用 $\boldsymbol{e}_1$，$\boldsymbol{e}_2$ 和 $-\boldsymbol{e}_1$，$-\boldsymbol{e}_2$ 表示为

$$\pm 2\boldsymbol{e}_1, \quad \pm 2\boldsymbol{e}_2, \quad \pm \boldsymbol{e}_1 \pm \boldsymbol{e}_2$$

把它推广到 n 维根空间，得到 $2n^2$ 个非零根，即

$$\pm 2\boldsymbol{e}_i, \quad \pm \boldsymbol{e}_i \pm \boldsymbol{e}_j \quad (i \neq j)$$

加上 n 个零根，它们构成 $n(2n+1)$ 维的 n 秩的典型 Lie 代数 C_n. 虽然当 $n=2$ 时，C_2 与 B_2 同构；但当 $n \geqslant 3$ 时，C_n 的根系与 B_n 的根已不相似，它们并不同构，而是不同的 Lie 代数，因此为典型 Lie 代数 C_n，$n \geqslant 3$.

3° 典型 Lie 代数 D_n

由 D_2 的根图可看到，它的 4 个非零根可表示为

$$\pm\boldsymbol{\alpha}=\pm(\alpha_1+\alpha_2),\quad \pm\boldsymbol{\beta}=\pm(\alpha_1-\alpha_2)$$

即 $\boldsymbol{e}_1\pm\boldsymbol{e}_2$. 推广到 n 维空间，则得到 $2n(n-1)$ 个非零根.

$$\boldsymbol{e}_i\pm\boldsymbol{e}_j\quad(i\neq j)$$

加上 n 个零根，得到 $n(2n-1)$ 维的 n 秩典型 Lie 代数 D_n，虽然 $D_2=A_1\oplus A_2$ 是半单 Lie 代数. 当 $n\geqslant3$ 时，这种根是单 σ 系，因而是单 Lie 代数，即典型 Lie 代数 D_n.

4° 典型 Lie 代数 A_n

为了推广典型 Lie 代数 A_2 到 A_n，定义 $n+1$ 维空间的正交基

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}_1&=(1,0,0,\cdots,0,0,0)\\ \boldsymbol{e}_2&=(0,1,0,\cdots,0,0,0)\\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\\ \boldsymbol{e}_n&=(0,0,0,\cdots,0,1,0)\\ \boldsymbol{e}_{n+1}&=(0,0,0,\cdots,0,0,1)\end{aligned}$$

比如 3 维空间的正交基为 $\boldsymbol{e}_1=(1,0,0)$，$\boldsymbol{e}_2=(0,1,0)$，$\boldsymbol{e}_3=(0,0,1)$，则 A_2 的 6 个非零根为

$$-\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_2,\ -\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_3,\ -\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_3,$$
$$\boldsymbol{e}_1-\boldsymbol{e}_2,\ \boldsymbol{e}_1-\boldsymbol{e}_3,\ \boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_3$$

它们是 3 维立方体内与六个棱相接的内接正六边形的顶点，可定义为

$$\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j\quad(i\neq j;\ i,j=1,2,3)$$

亦即 A_2 的根图为 3 维立方体内 2 维平面上的图形. 如图 9.6.7 所示.

因而在一般情况下，由 $n+1$ 维空间 $n+1$ 个正交基矢 $\boldsymbol{e}_i$，$i=1,2,\cdots,n+1$ 构成的根向量.

$$\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j\quad(i\neq j;\quad i,j=1,2,\cdots,n+1)$$

有 $n(n+1)$ 个，对于 $n+1$ 维根空间的任一矢量 $X=(x^1,x^2,\cdots,x^{n+1})$（因为根空间是 Lie 代数的对偶空间，它的矢量的分量为逆变分量，用 x^i 表示），如果取

$$\sum_{i=1}^{n+1}x^i=0$$

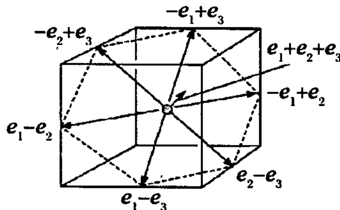


图 9.6.7　正交基下 A_2 的根图

则满足这种条件的矢量 X 是 $n+1$ 维空间 n 维超平面上的向量，n 维超平面是 n 维的，因而在这个超平面上只有 n 个零根. 所以 $\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j$ 型的非零根与 n 个零根构成 Lie 代数在 n 维超平面上的全部根，因而 A_n 是 $n(n+1)+n=n(n+2)$ 维 n 秩的 Lie 代数，即典型 Lie 代数 A_n.

注意全部非零根 $\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j$ 和零根都在 $n+1$ 维空间的 n 维超平面上，因而秩为 n.

2. *例外 Lie 代数*

单 Lie 代数除上面讨论的 4 个典型 Lie 代数系列外，还有而且仅有 5 个所谓例外 Lie 代数. 在下节中将利用 Dynking 图从单 σ 系根系来证明这一点，在这里仅就例外 Lie 代

数给以简单说明.

1° 例外 Lie 代数 F_4

Lie 代数 B_4 的根在 4 维空间的正交基矢 e_i, $i=1, 2, 3, 4$ 中为

$$\pm e_i, \ \pm e_i \pm e_j \quad (i\neq j;\ i, j=1, 2, 3, 4)$$

共 $24^2=32$ 个非零根，加上 4 个零根，它的维数为 36. 再加上 16 个根，即

$$\frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4)$$

这 48 个非零根构成一单 σ 系，它们构成一个单 Lie 代数，记为 F_4，因而 F_4 的维数为 52，秩为 4. B_4 是 F_4 的子 Lie 代数.

2° 例外 Lie 代数 E_6

Lie 代数 A_5 有 56 =30 个非零根，它们为

$$e_i - e_j, \quad i, j=1, 2, 3, 4, 5, 6$$

如果再加上如下的 37 个根，这些根为

$$\pm\sqrt{2}e_7,\ \frac{1}{2}(\underbrace{\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4 \pm e_5 \pm e_6}_{\text{只取三个正号和三个负号}}) \pm \frac{1}{\sqrt{2}}e_7$$

全部非零根为 72 个，加上 5 个零根，Lie 代数维数为 72，这个 Lie 代数称为例外 Lie 代数 E_6，显然 A_5 是它的子代数，而且 $\pm\sqrt{2}e_7$ 本身为 Lie 代数 A_1，因而 A_1 也是它的子代数.

3° 例外 Lie 代数 E_7

Lie 代数 A_7 有 56 个非零根，

$$e_i - e_j \quad (i\neq j;\ i, j=1, 2, \cdots, 8)$$

再加上根

$$\frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4 \pm e_5 \pm e_6 \pm e_7 \pm e_8)$$

其中 4 个正号、4 个负号共 70 个，这些全部非零根为 126 个，加上 7 个零根得到 133 维的 Lie 代数，称为 Lie 代数 E_7，A_7 为它的子代数.

4° 例外 Lie 代数 E_8

Lie 代数 D_8 的 112 个非零根为

$$\pm e_i \pm e_j \quad (i\neq j;\ i, j=1, 2, \cdots, 8)$$

再加上如下的根

$$\frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4 \pm e_5 \pm e_6 \pm e_7 \pm e_8)$$

其中取偶数个正号，这种根一共有 128 个. 于是，总非零根为 240 个，加以 8 个零根，得到 248 维的 Lie 代数 E_8，D_8 是它的子代数.

5° 例外 Lie 代数 G_2

前面已经讨论了它的根图，如果用 3 维空间的正交基矢，可把 G_2 的非零根表示为

$$e_i - e_j, \quad \pm(e_i + e_j - 2e_k) \quad (i\neq j\neq k;\ i, j, k=1, 2, 3)$$

由这些讨论看到全部单 Lie 代数的非零根可用 N 维实空间的正交基矢 $\{e_1=(1, 0, \cdots, 0), e_2=(0, 1, 0, \cdots), \cdots, e_N=(0, 0, \cdots, 0, 1)\}$ 的线性组合表示. 对 Lie 代数

B_n, C_n, D_n, $N=n$, 即它们的全部非零根分布在 n 维空间中. Lie 代数 A_n, $N=n+1$, 它的全部非零根分布在 $n+1$ 维空间中的 n 维超平面上. 例外 Lie 代数 F_4, E_8 的根分别分布在 4 维和 8 维的空间中;例外 Lie 代数 E_6 秩为 5, 它的根分布在 6 维空间的 5 维超平面上;例外 Lie 代数 E_7 秩为 7, 它的非零根分布在 8 维空间的 7 维超平面上;例外 Lie 代数 G_2 秩为 2, 它的根分布在 2 维平面上.

9.7　素根, Dynkin 图, 单 Lie 代数的分类

对于秩 $r>2$ 的 Lie 代数, 利用前两节的根分析它的根系是不方便的, 为了清晰地对根进行讨论, 须引入素根(simple root)的概念, 并在素根的基础上引进 Dynkin 图, 利用这种方法, 可对全部 Lie 代数的根系进行讨论, 并论证单 Lie 代数仅有上节所讨论的那样一些类型.

9.7.1　素根与 Cartan-Weyl 标准基

1. 素根与素根系(Π 系)

r 秩的单 Lie 代数的非零根 $\boldsymbol{\alpha}$ 可在一定坐标系下表示为 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r)$, α_i 为 $\boldsymbol{\alpha}$ 的第 i 个分量. 称第一个非零分量 $\alpha_i>0$ 的根为正根, 记为 $\boldsymbol{\alpha}^+$;反之为负根, 记为 $\boldsymbol{\alpha}^-$. 一般对于 n 维 r 秩的半单 Lie 代数 g, 它的$(n-r)$个非零根中有一半是正根, 一半为负根, 而且$(-\boldsymbol{\alpha}^+)$为负根. 由于半单 Lie 代数如果 $\boldsymbol{\alpha}$ 是根, 则 $-\boldsymbol{\alpha}$ 也一定是根, 因而正根与负根一定各占一半.

在正根的基础上可定义素根.

定义 9.7.1(素根)　如果一个正根不能分解为两个正根之和, 则称这个正根为素根.

可以证明半单 Lie 代数 g 的根系中存在而且仅存在 γ 个素根, 从$\dfrac{1}{2}(n-r)$个正根中可选出 r 个素根, 具体选取方法是可以不同的. 下边作为例子, 对 4 个典型 Lie 代数系列给出了它们的素根, 素根可以有不同的选择. 下面给出的只是在正交基矢展开下的一种形式. 以 Σ 表示它们的根系, 以 Π 表示它们的素根. 并计算素根的内积$(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)$和不同素根间的内积$(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_j)$.

(1) A_n:

$$\Sigma:\quad \boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j,\quad i\neq j,\quad 1\leqslant i, j=1, 2, \cdots, n+1$$

$$\Pi:\quad \boldsymbol{\alpha}_i=\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_{i+1},\quad i=1, 2, \cdots, n,\quad 共\ n\ 个$$

$$(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_j)=\begin{cases}2, & i=j\\ -1, & |i-j|=1\\ 0, & |i-j|>1\end{cases}$$

(2) B_n:

$$\Sigma:\quad \pm\boldsymbol{e}_i\pm\boldsymbol{e}_j,\quad i<j,\quad \pm\boldsymbol{e}_i,\quad i, j=1, 2, \cdots, n$$

$$\Pi:\quad \boldsymbol{\alpha}_i=\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_{i+1},\quad i=1, 2, \cdots, n-1,\quad \boldsymbol{\alpha}_n=\boldsymbol{e}_n,\quad 共\ n\ 个$$

$$(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)=\begin{cases}2, & i=j<n\\ 1, & i=j=n\\ -1, & |i-j|=1\\ 0, & |i-j|>1\end{cases}$$

(3) C_n:

Σ: $\pm\boldsymbol{e}_i\pm\boldsymbol{e}_j$, $i<j$, $2\boldsymbol{e}_i$, $i,j=1,2,\cdots,n$

Π: $\boldsymbol{\alpha}_i=\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_{i+1}$, $i=1,2,\cdots,n-1$, $\alpha_n=2\boldsymbol{e}_n$, 共 n 个

$$(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)=\begin{cases}4, & i=j=n\\ 2, & i=j<n\\ -1, & |i-j|=1,\ i,j<n\\ -2, & i=n-1,j=n\text{ 或 }i=n,j=n-1\\ 0, & |i-j|>1\end{cases}$$

(4) D_n:

Σ: $\pm\boldsymbol{e}_i\pm\boldsymbol{e}_j$, $i\neq j=1,2,\cdots,n$

Π: $\boldsymbol{\alpha}_i=\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_{i+1}$, $i=1,2,\cdots,n-1$, $\boldsymbol{\alpha}_n=\boldsymbol{e}_{n-1}-\boldsymbol{e}_n$, 共 n 个

$$(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)=\begin{cases}2, & i=j\\ 0, & i=n-1,j=n\text{ 或 }i=n,j=n-1\\ -1, & |i-j|=1,\ i,j\neq n\\ 0, & |i-j|>1\end{cases}$$

对 4 个典型 Lie 代数系列，不同素根间的内积有共同特征，即

$$(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)\leqslant 0,\quad \boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j\in\Pi,\quad r\neq j$$

这是素根的一个重要特征. 这个典型 Lie 代数系列的秩均为 n，即 $r=n$.

下面将要证明，具有$(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)\leqslant 0$ 性质的全部素根是线性无关的.

定理 9.7.1　半单 Lie 代数 g 的根系 Σ 中满足条件$(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)\leqslant 0$ 的全部素根集合$\{\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r\}$是线性无关的.

证明　用反证法. 假如满足条件$(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)\leqslant 0$ 的素根集合$\{\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r\}$是线性相关的，则其中某一 $\boldsymbol{\alpha}_k$ 可写为其它$\{\boldsymbol{\alpha}_i\}$的线性组合，即

$$\boldsymbol{\alpha}_k=\sum_i{}'\lambda_i\boldsymbol{\alpha}_i=\sum_i{}'\nu_i\boldsymbol{\alpha}_i+\sum_j{}'\mu_j\boldsymbol{\alpha}_j=X+Y \tag{9.7.1}$$

上式求和号上的撇“′”表示求和中不包括 $\boldsymbol{\alpha}_k$，把组合系数 λ_i 中 $\lambda_i>0$ 的表示为 ν_i，集中在(9.7.1)式的第一个求和中，把 $\lambda_i<0$ 的记为 μ_i 集中在第二个求和中.

容易得到

$$(X,Y)=\sum_{i,j}\nu_i\mu_j(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)\geqslant 0,\quad(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)\leqslant 0,\nu_i>0,\quad \mu_i<0$$

因而

$$(\boldsymbol{\alpha}_k,X)=(X+Y,X)=(X,X)+(Y,X)\geqslant 0 \tag{9.7.2}$$

另一方面

$$(\boldsymbol{\alpha}_k,X)=\sum_i\nu_i(\boldsymbol{\alpha}_k,\boldsymbol{\alpha}_i)<0,\quad(\boldsymbol{\alpha}_k,\boldsymbol{\alpha}_i)\leqslant 0 \tag{9.7.3}$$

从而得到$(\boldsymbol{\alpha}_k, X)$即大于0，又小于0的矛盾结果.

因而证明$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_r)$之间是线性无关的.

对于这些线性无关的素根存在如下定理.

定理9.7.2　半单 Lie 代数 g 的根系 Σ 中取出全部素根，构成一个集合 $\Pi=\{\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_r\}$，则素根具有如下性质：

(1) 若 $\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_j \in \Pi$，则$(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_j) \leqslant 0$；

(2) 集合 $\Pi=\{\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_r\}$构成根向量的一个基矢，集合 Σ 中的任意非零根 $\boldsymbol{\alpha} \in \Sigma$ 都可表示为

$$\boldsymbol{\alpha} = \pm(\nu_1\boldsymbol{\alpha}_1 + \nu_2\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + \nu_r\boldsymbol{\alpha}_r), \quad \nu_i \geqslant 0 \text{ 的整数}$$

证明　首先利用反证法，证明第一点，令$\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \Pi$，而且$\boldsymbol{\alpha} \neq \boldsymbol{\beta}$，若$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \geqslant 0$，根据定理9.5.3，

$$\frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})} = l_1, \quad \frac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})} = l_2$$

l_1, l_2 为正整数($(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})>0$). 因而存在含 $\boldsymbol{\alpha}$ 的 $\boldsymbol{\beta}$ 根列，$\boldsymbol{\alpha}-l_1\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\alpha}-(l_1-1)\boldsymbol{\beta}$, $\cdots$, $\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\alpha}+2\boldsymbol{\beta}$, $\cdots$, $\boldsymbol{\alpha}+l_2\boldsymbol{\beta}$，即$\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta} \in \Sigma$, $\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha} \in \Sigma$. $\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$ 或$\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$ 中一定有1个正根，令$\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$ 为正根，令$\varphi=\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$，于是$\boldsymbol{\alpha}=\varphi+\boldsymbol{\beta}$，即$\boldsymbol{\alpha}$ 可分解为两个正根φ 和$\boldsymbol{\beta}$ 之和，这与$\boldsymbol{\alpha} \in \Pi$ 是矛盾的，同理$\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$ 也不能是正根，如果是正根也存在同样矛盾. 这就证明了素根$\boldsymbol{\alpha}$ 与$\boldsymbol{\beta}$ 的内积$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \leqslant 0$.

下面证明 Σ 中任一根都可表示为素根的线性组合. 首先把$\frac{1}{2}(n-r)$个正根编序，两个正根，比较它们在一定基矢下的分量，如果它们的第1个分量到第 i 个分量都相同，第 $i+1$ 个分量出现不同时，第 $i+1$ 个分量小的称为比另一个分量大的小. 这样，就可把$\frac{1}{2}(n-r)$个正根按大小编号，得到一个有序的系列，α_1^+, α_2^+, $\cdots$, $\alpha_{(n-r)/2}^+$. 如果第 l 个正根 α_l^+ 是素根 $\alpha_p^+ \in \Pi$，它一定是 Π 中的某一个，即 $\alpha_p^+ \in \Pi$. 若 $\boldsymbol{\alpha}_p^+$ 不是素根，它一定可分解为两个正根之和，即

$$\boldsymbol{\alpha}_p^+ = \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}, \ \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta} \in \Sigma, \ \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \text{ 为正根}$$

如果$\boldsymbol{\alpha}$ 和$\boldsymbol{\beta}$ 是素根，则$\boldsymbol{\alpha}_p^+ = \boldsymbol{\alpha}_i + \boldsymbol{\alpha}_j (\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\alpha}_j)$，如果$\boldsymbol{\alpha}$ 或$\boldsymbol{\beta}$ 中有一个不是素根，或者两个都不是素根，则$\boldsymbol{\alpha}$ 或$\boldsymbol{\beta}$，以及$\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 还可分解为两个正根的和，因为正根是有限的，这种分解最后可得到全部的素根之和，即

$$\boldsymbol{\alpha}_l^+ = \sum_i \lambda_i \boldsymbol{\alpha}_i, \quad \boldsymbol{\alpha}_i \in \Pi$$

λ_i 为正整数，对于负根$\boldsymbol{\alpha}_l = -\boldsymbol{\alpha}_l^+$，则

$$\boldsymbol{\alpha}_l^- = -\sum_i \lambda_i \boldsymbol{\alpha}_i$$

于是任意根$\boldsymbol{\alpha} \in \Sigma$，可得到

$$\boldsymbol{\alpha} = \sum_i \lambda_i \boldsymbol{\alpha}_i \tag{9.7.4}$$

这就证明了上述定理.

由这个定理可得到全部素根是线性无关的，它们构成根空间的一组基矢，任何根都

可表示为它们的线性组合.

全体素根的集合 Π 称为 π 系，也称基础根系.

π 系的特点是:

(1) π 系的向量集合 Π 中的全部向量是线性无关的;

(2) $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \Pi$，则 $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \leqslant 0$，于是 $\dfrac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}$ 和 $\dfrac{2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}$ 为负整数.

关于素根还存在下面的定理.

定理 9.7.3 若 $\boldsymbol{\alpha}_i$, $\boldsymbol{\alpha}_j$ 是半单 Lie 代数 g 的两个素根，则:

(1) $\dfrac{2(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_j)}{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)} = -l$，$l$ 为 0 或正整数;

(2) $\boldsymbol{\alpha}_i$, $\boldsymbol{\alpha}_j$ 间的夹角 φ_{ij} 只能为 90°，120°，135°和 150°，它们的根长比只能为 1，$\sqrt{2}$，$\sqrt{3}$ 或不确定，即

$$\frac{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)}{(\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\alpha}_j)} = \begin{cases} \text{不确定}, & \varphi_{ij} = 90° \\ 1, & \varphi_{ij} = 120° \\ 2, & \varphi_{ij} = 135° \\ 3, & \varphi_{ij} = 150° \end{cases}$$

$\boldsymbol{\alpha}_i$ 为长根.

证明 由定理 9.7.2 知道对于素根 $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \leqslant 0$，再由定理 9.5.3 自然说明了此定理的(1)，因此立即可得到素根间夹角的余弦

$$\cos\varphi_{ij} = \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_j)}{[(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)(\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\alpha}_j)]^{1/2}} \leqslant 0$$

即 φ_{ij} 在第二象限，它们的夹角只能为 90°，120°，135°和 150°. 根长比的平方为不确定或者为 1，2，3.

2. Cartan 矩阵

通常定义 $\dfrac{2(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_j)}{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)}$ 为 Cartan 矩阵 $\hat{A}$ 的矩阵元，即

$$A_{ij} = \frac{2(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_j)}{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)} \tag{9.7.5}$$

利用前面给出的素根表达式，容易求出典型 Lie 代数和例外 Lie 代数的 Cartan 矩阵. 下面分别给出了单 Lie 代数的 Cartan 矩阵.

$$A_n = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$B_n = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

$$C_n = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$D_n = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$G_2 = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 2 \end{pmatrix}$$

$$F_4 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -2 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -10 \end{pmatrix}$$

$$E_6 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$E_7 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$E_8 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

3. C-W 标准基

在 9.6 节中已讨论了 C-K 度规张量为

$$g_{ij} = \sum_{\alpha} \alpha_i \alpha_j$$

注意上式中 α_i，α_j 分别为根 $\boldsymbol{\alpha}$ 的第 i 个和第 j 个分量，可以通过对根长$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})$归一化，即令归一化的根 $\boldsymbol{\alpha}'$为

$$\boldsymbol{\alpha}' = N\boldsymbol{\alpha}$$

使归一化后的度规张量为

$$g_{ij} = \sum_{\alpha} \alpha_i{}' \alpha_j{}' = \delta_{ij} \qquad (9.7.6)$$

利用根的正交基矢展开，可以求出归一化系 N，下面给出典型 Lie 代数的归一化系数：

$$A_n : [2(n+1)]^{-\frac{1}{2}}$$

$$B_n : [2(n-1)]^{-\frac{1}{2}}$$

$$C_n : [2(n+2)]^{-\frac{1}{2}}$$

$$D_n : [2(n-2)]^{-\frac{1}{2}}$$

$$G_2 : (24)^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2,3}}$$

归一化的根长为

$$A_n : (\alpha_i, \alpha_i) = \frac{1}{2(n+1)}$$

$$B_n : (\alpha_i, \alpha_i) = \frac{1}{2(2n-1)}$$

$$C_n : (\alpha_i, \alpha_i) = \frac{1}{2(2n+2)}$$

$$D_n : (\alpha_i, \alpha_i) = \frac{1}{2(2n-2)}$$

称这种归一化根下的 C-W 基为 C-W 标准基，在这种基下半单 Lie 代数具有最简单的代数结构：

$$[H_i, H_j] = 0$$

$$[H_i, E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha$$

$$[E_\alpha, E_{-\alpha}] = \alpha_i H_j$$

$$[E_\alpha, E_\beta] = \begin{cases} 0, & \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta} \notin \Sigma \\ N_{\alpha\beta} E_{\alpha+\beta}, & \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta} \in \Sigma \end{cases}$$

对于标准 C-W 基，度规张量为

$$g_{ij} = \sum_\alpha \alpha_i \alpha_j = \delta_{ij}$$

$$g_{\alpha,-\alpha} = C^\alpha_{\alpha,i} C^i_{-\alpha,\alpha} + C^{\alpha+\tau}_{\alpha,\tau} C^\tau_{-\alpha,\alpha+\tau} = \Sigma \alpha_i \alpha_i + N_{\alpha,\tau} N_{-\alpha,\alpha+\tau} = 1$$

由(9.5.8)式可计算 $N_{\alpha,\tau-\alpha,\alpha+\tau}$.

9.7.2　Dynkin 图与单 Lie 代数的素根系

定理 9.7.3 给出半单 Lie 代数的素根 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta} \in \Pi$ 之间的夹角只能有 $\varphi_{\alpha\beta} = 90°$, 120°, 135°和 150°三种情况，而且在一定夹角时两个素根的根长比除 $\varphi_{ij} = 90°$的情况外是完全固定的. 因而可用四种图形表示这四种情况下的素根. 图形中用圆点代表 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 中的短根，用圆圈代表长根，当它们间夹角为 90°时，圈与点间不连线，即

○ ●

当夹角为 120°时，用单线连接圈与点，因为根长比为 1，图形为

○—● = ○—○

当夹角为 135°时，用双线连接圈与点，即

○═●

当夹角为 150°时，用三条线连接圈与点，即

○≡●

对于 r 秩的半单 Lie 代数 g，它的 r 个素根相互间按夹角和根长比用上述四种单元图形画出来就得到了描述素根的图形，称为 Lie 代数 g 的 Dynkin 图.

例如:

(1) Lie 代数 A_2. 它的两个素根为 $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3$，素根的内积为$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2) = -1$，因而夹角为 120°，于是 Dynkin 图为

○—○

(2) Lie 代数 A_3. 它的素根为 $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3$, $\boldsymbol{\alpha}_3 = \boldsymbol{e}_3 - \boldsymbol{e}_4$，素根的内积为 $(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2) = -1$, $(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_3) = 0$, $(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_3) = -1$. 这说明 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 与 $\boldsymbol{\alpha}_2$ 间夹角为 120°, $\boldsymbol{\alpha}_2$ 与 $\boldsymbol{\alpha}_3$ 间夹角也是 120°，而 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 与 $\boldsymbol{\alpha}_3$ 间夹角为 90°，因而 Dynkin 图为

○—○—○
α_1　α_2　α_3

因为 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 与 $\boldsymbol{\alpha}_3$ 夹角为 90°，即$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_3) = 0$，故图中代表 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 和 $\boldsymbol{\alpha}_3$ 的○不相连接.

(3) Lie 代数 B_2. 它的素根为 $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{e}_2$，而

$$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2) = -1, \frac{(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1)}{(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_2)} = 2$$

因而 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 与 $\boldsymbol{\alpha}_2$ 间的夹角为 135°，故此 Dynkin 图为

○═●

(4) Lie 代数 B_3. 它的素根为 $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3$, $\boldsymbol{\alpha}_3 = \boldsymbol{e}_3$，而

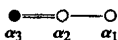
$$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2) = -1, (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_3) = 0, (\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_3) = -1$$

$$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1) = (\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_2) = 2, (\boldsymbol{\alpha}_3, \boldsymbol{\alpha}_3) = 1$$

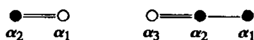
因此夹角

$$\varphi_{12} = 135°, \quad \varphi_{23} = 120°, \quad \varphi_{13} = 90°$$

它的 Dynkin 图为



(5) Lie 代数 C_2 和 C_3. 通过相似分析可得到它们的 Dynkin 图分别为

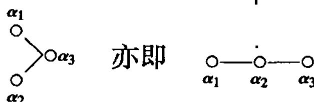


可见 B_2 和 C_2 的 Dynkin 图是一样的，这是因为它们同构. 而 B_3 和 C_3 的 Dynkin 图是不同的，在 B_3 中 $\boldsymbol{\alpha}_2$ 与 $\boldsymbol{\alpha}_3$ 根长相同，但是它们与 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 相比是长根，而 C_3 中 $\boldsymbol{\alpha}_2$ 和 $\boldsymbol{\alpha}_3$ 是短根.

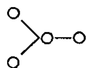
(6) Lie 代数 D_2 和 D_3. 它们的素根分别为 $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3$, $\boldsymbol{\alpha}_3 = \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3$，于是得到 D_2 的 Dynkin 图为○ ○，$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2) = 0$，可见它是两个单元素的加和，即 $D_2 = A_1 \oplus A_1$，即 D_3 的素根内积为

$$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2) = -1, (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_3) = -1, (\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_3) = 0$$

而且 $(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1) = 2$, $(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_2) = 2$, $(\boldsymbol{\alpha}_3, \boldsymbol{\alpha}_3) = 2$. 因此 Dynkin 图为



(7) Lie 代数 D_4. 它的素根为 $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3$, $\boldsymbol{\alpha}_3 = \boldsymbol{e}_3 - \boldsymbol{e}_4$, $\boldsymbol{\alpha}_4 = \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_4$，通过相似计算可得到 Dynkin 图为



(8) Lie 代数 G_2. 它的素根为 $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{\alpha}_2 = -\boldsymbol{e}_1 + 2\boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3$，由此得到

$$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2) = -3, (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1) = 2, (\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_2) = 6$$

因此 Dynkin 图为



这些比较简单的单 Lie 代数(D_2 为半单 Lie 代数)的 Dynkin 图，基本上反映了半单 Lie 代数 Dynkin 图的全部特征.

9.7.3 单 Lie 代数素根系 Π 的 Dynkin 图分析

在 9.5 节中已指出 Lie 代数的性质由它的根系决定，半单 Lie 代数的充要条件是它的根系为 σ 系，而单 Lie 代数的充要条件是它的根系为单 σ 系. 而根系 Σ 的性质又由素根系 Π 的性质决定.

下面给出一个定理.

定理 9.7.4 若 Σ 是半单 Lie 代数 g 的非零根系，Π 是它的素根系，则 Σ 为单 σ 系的充要条件是它的 Π 系为单 π 系.

所谓单 π 系，是指 π 系的向量集合 Σ 不能分解为两个都是 π 系的子集 Σ_1 和 Σ_2 的并集(证明见万哲先《李代数》). 由这个定理得到如下推论，即

推论 半单 Lie 代数 g 是单 Lie 代数的充要条件，是它的素根集合 Π，是一个单 π

系.

于是寻找全部单 Lie 代数的问题，就归结为寻找全部可能的单 π 系的问题，这个问题可利用 Dynkin 图的图形方法来完成. 比如前面的 Lie 代数 D_2 的 Dynkin 图○ ○，这表明它包括两个单 π 系，因而不是单 Lie 代数. 所谓连接在一起的 Dynkin 图，就是 Lie 代数的 Dynkin 图是一个图形，不能包括若干个单独的图形. 如果包括若干个单独的图形，就证明它的素根系是几个单 π 系的并集，因而是半单 Lie 代数，而不是单 Lie 代数，称不包括独立的子图的 Dynkin 图为单 π 系 Dynkin 图.

下面证明单 π 系 Dynkin 图的三个主要性质.

性质 9.7.1　单 π 系 Dynkin 必须是树图，即图形中没有闭路.

证明　假定 Dynkin 图中有一闭路，构成这个闭路的为素根 $\boldsymbol{\alpha}_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2$，…，$\boldsymbol{\alpha}_l \in \Pi$，$\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{\alpha}_{l+1}$，因为它们为闭路 $(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2) \neq 0$，$(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_3) \neq 0$，…，$(\boldsymbol{\alpha}_{l-1}, \boldsymbol{\alpha}_l) \neq 0$，$(\boldsymbol{\alpha}_l, \boldsymbol{\alpha}_1) \neq 0$，$(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_{i+2}) = 0$. 因而 $\sum_{i=1}^{l} \boldsymbol{\alpha}_i / \|\boldsymbol{\alpha}_i\|$ 与它自身的内积大于 0，即

$$
\begin{aligned}
0 &< \left(\sum_{i=1}^{l} \frac{\boldsymbol{\alpha}_i}{\|\boldsymbol{\alpha}_i\|}, \sum_{i=1}^{l} \frac{\boldsymbol{\alpha}_i}{\|\boldsymbol{\alpha}_i\|}, \right) \\
&= \sum_{i=1}^{l} \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)}{\|\boldsymbol{\alpha}_i\|^2} + 2 \sum_{i=1}^{l} \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_{i+1})}{\|\boldsymbol{\alpha}_i\| \, \|\boldsymbol{\alpha}_{i+1}\|} \\
&= 2 \sum_{i=1}^{l} \cos\varphi_{i,\,i+1}
\end{aligned}
$$

在得到此式时，利用了 $(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_{i+l}) = 0$，$l = 2, 3\cdots$，因为 α_i 与 α_{i+l} 不相联.

另一方面，由于 $\boldsymbol{\alpha}_i \in \Pi$，因而 $\cos\varphi_{i,\,i+1}$ 只能为 $-\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{\sqrt{2}}{2}$ 和 $-\frac{\sqrt{3}}{2}$（即 120°，135° 或 150°，不能为 90°，因为它们相连，即 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 与 $\boldsymbol{\alpha}_{i+1}$ 间由单线、双线或三线连接）. 于是

$$
\left(\sum_{i=1}^{l} \frac{\boldsymbol{\alpha}_i}{\|\boldsymbol{\alpha}_i\|}, \sum_{i=1}^{l} \frac{\boldsymbol{\alpha}_i}{\|\boldsymbol{\alpha}_i\|}, \right) \leqslant l - 2\frac{l}{2} = 0
$$

式中取 $\cos\varphi_{i,\,i+1} = -\frac{1}{2}$，使 $2\sum_{i=1}^{l} \cos\varphi_{i,\,i+1} = -\frac{l}{2}$ 是 $\sum_{i=1}^{l} \cos\varphi_{i,\,i+1}$ 的最大值，因此有上述不等式. 显然与

$$
\left(\sum_{i=1}^{l} \frac{\boldsymbol{\alpha}_i}{\|\boldsymbol{\alpha}_i\|}, \sum_{i=1}^{l} \frac{\boldsymbol{\alpha}_i}{\|\boldsymbol{\alpha}_i\|} \right) > 0
$$

相矛盾，从而说明不能存在闭路.

性质 9.7.2　单 π 系 Dynkin 图中任何素根 $\alpha \in \Pi$ 不可能有 3 条以上的线与其连接，也就是说最多只能连三条线.

证明　设 $\boldsymbol{\alpha} \in \Pi$，在 Dynkin 图中，它与 $k > 3$ 条线相连，与它相连接的素根为 $\boldsymbol{\alpha}_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2$，…，$\boldsymbol{\alpha}_i$，$i \leqslant k$. 因为 $\boldsymbol{\alpha}$，$\boldsymbol{\alpha}_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2$，…，$\boldsymbol{\alpha}_i$ 不能够成闭路，因而 $\boldsymbol{\alpha}_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2$，…，$\boldsymbol{\alpha}_i$ 之间一定相互垂直，即

$$
(\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\alpha}_l^{*}) = 0 \quad (j \neq l; j, l = 1, 2\cdots, i)
$$

（若 $(\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\alpha}_l) > 0$，则 $\boldsymbol{\alpha}_j$ 与 $\boldsymbol{\alpha}_l$ 相连，而 $\boldsymbol{\alpha}_j$，$\boldsymbol{\alpha}_l$ 均与 $\boldsymbol{\alpha}$ 相连，则 $\boldsymbol{\alpha}$，$\boldsymbol{\alpha}_j$，$\boldsymbol{\alpha}_l$ 构成闭路，根据性

质9.7.1是不允许的）. 以V表示$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_i)$张成的子空间，在$V$中选取与$\boldsymbol{\alpha}_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_i$都垂直的一个向量$\gamma \neq 0$，由于$\gamma$与$\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_i$相垂直，根据$(i+1)$维空间的广义勾股定理，则有

$$\cos^2\varphi_{\gamma\alpha} + \sum_{j=1}^{i} \cos^2\varphi_{\alpha, \alpha_j} = 1$$

因为$\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_i \in \Pi$，而且$\boldsymbol{\alpha}$与$\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_i$都不垂直，所以$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_j) < 0$，而且$\gamma$不与$\alpha$正交，因而$1 > \cos^2\varphi_{\gamma\alpha} \neq 0$，于是

$$\sum_{j=1}^{i} \cos^2\varphi_{\alpha, \alpha_j} < 1 \quad \text{或} \quad \sum_{j=1}^{i} 4\cos^2\varphi_{\alpha, \alpha_j} < 4$$

而根据 Dynkin 图的规定，$\boldsymbol{\alpha}$与$\boldsymbol{\alpha}_j$间的连线数l_j为

$$4\cos^2\varphi_{\alpha, \alpha_j} = l_j$$

即

$$\sum_{j=1} 4\cos^2\varphi_{\alpha, \alpha_j} l_j < 4$$

这就证明了与素根$\boldsymbol{\alpha}$相连的线的数目$l < 4$的命题.

性质9.7.3 如果在单π系 Dynkin 图中包括一个$\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_k$的简单链，即

○——○——○┈┈┈○——○

$\boldsymbol{\alpha}_1 \quad \boldsymbol{\alpha}_2 \quad \boldsymbol{\alpha}_3 \cdots\cdots \boldsymbol{\alpha}_{k-1} \quad \boldsymbol{\alpha}_k$

单π系 Dynkin 图为

Π $\boxed{\Pi_1}$ ⋯ ○——○——○┈┈┈○——○ ⋯ $\boxed{\Pi_2}$

$\boldsymbol{\alpha}_1 \quad \boldsymbol{\alpha}_2 \quad \boldsymbol{\alpha}_3 \cdots\cdots \boldsymbol{\alpha}_{k-1} \quad \boldsymbol{\alpha}_k$

其中$\boxed{\Pi_1}$，$\boxed{\Pi_2}$为子 Dynkin 图，虚线⋯可能是单线，也可能是双线. 如果把简单链收缩为一个素根$\boldsymbol{\alpha}$，即以$\boldsymbol{\alpha}$代替上述 Dynkin 图Π中的简单链，则 Dynkin 图变为新的 Dynkin 图

Π'： $\boxed{\Pi_1}$ ⋯●⋯ $\boxed{\Pi_2}$

$\boldsymbol{\alpha}$

虚线表示的单线或双线不变，如果Π'是允许的 Dynkin 图，则Π也是允许的 Dynkin 图，反之，如果Π'是不允许的，则Π也是不允许的.

证明 为了证明这一点，令

$$\boldsymbol{\alpha} = \sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{\alpha}_i$$

则

$$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}) = \sum_{i=1}^{k-1} \{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i) + 2(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_{i+1})\} + (\boldsymbol{\alpha}_k, \boldsymbol{\alpha}_k) = (\boldsymbol{\alpha}_k, \boldsymbol{\alpha}_k)$$

在得到此式时利用了

$$(\alpha_i, \alpha_{i+l}) = 0, > 1$$

或

$$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}) = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1) + \sum_{i=2}^{k} \{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i) + 2(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_{i+1})\} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1)$$

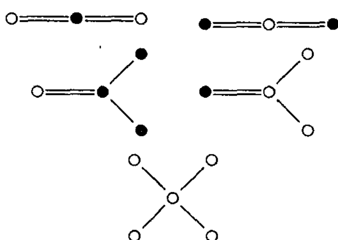
根据 Dynkin 图的规则，这就证明了上述命题.

由这三点性质可以得到下述结论：

(1) 由性质 9.7.2，任一素根 $\boldsymbol{\alpha}$ 与它的连线不能超过三条，可得到：

(a) Dynkin ○≡● 是一个独立的图形，它不能出现在任何其它 Dynkin(图)之中. 因为在它一端再加任何素根连线都使之超过了三条，它是例外 Lie 代数 G_2 的 Dynkin 图.

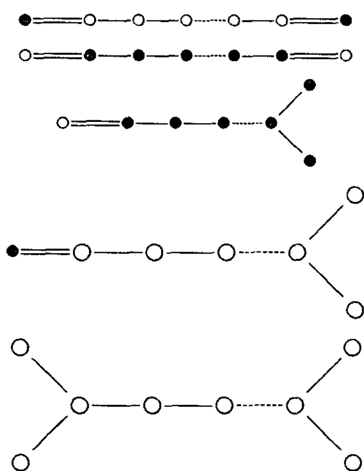
(b) 由性质 9.7.2 还可知图形



都不是允许的 Dynkin 图.

(c) 单 π 系 Dynkin 图中只能包括不超过两种长度的素根.

(2) 由这些图形，再利用性质 9.7.3，可知图形



都不是 Dynkin 图.

在排除这些图形后，考虑到单 Dynkin 图不是树图，所有可能的单 Dynkin 图只能有如下四种：

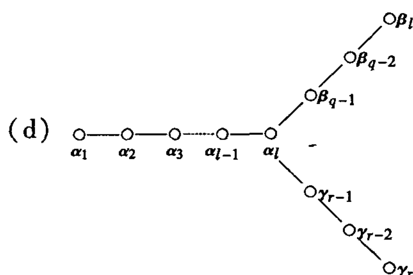
(a) ○≡●

(b) ○—○—○┈○—○

$\boldsymbol{\alpha}_1$　$\boldsymbol{\alpha}_2$　$\boldsymbol{\alpha}_3 \cdots \boldsymbol{\alpha}_{k-1}$　$\boldsymbol{\alpha}_k$

(c) ○—○┈○—○═●—●—●┈●

$\boldsymbol{\alpha}_1$　$\boldsymbol{\alpha}_2 \cdots \boldsymbol{\alpha}_{k-1} \boldsymbol{\alpha}_k$　$\boldsymbol{\beta}_l$　$\boldsymbol{\beta}_{l-1}$　$\boldsymbol{\beta}_{l-2} \cdots \boldsymbol{\beta}_1$

(d) 

前面指出 Dynkin 图(a)是例外 Lie 代数 G_2，Dynkin 图(b)是典型 Lie 代数 $A_k(k\geqslant 1)$. 下面讨论单 Dynkin 图(c)的允许结构.

Dynkin 图(c)中包括：k 个长素根 $\boldsymbol{\alpha}_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2$，…，…$\boldsymbol{\alpha}_k$，它们是单线连接，说明 $(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_{i+1}) = (\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i) = -1$，$(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i) = 2$；$l$ 个短素根 $\boldsymbol{\beta}_i$，由此 $(\boldsymbol{\beta}_i, \boldsymbol{\beta}_{i+1}) = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{\beta}_i, \boldsymbol{\beta}_i) = \frac{1}{2}$，$(\boldsymbol{\beta}_i, \boldsymbol{\beta}_i) = -1$，而 $(\boldsymbol{\alpha}_k, \boldsymbol{\beta}_l) = -1$.

令 $\boldsymbol{\alpha} = \sum_{i=1}^{k} i\boldsymbol{\alpha}_i$，$\boldsymbol{\beta} = \sum_{j=1}^{l} j\boldsymbol{\beta}_j$ 容易得到

$$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}) = \sum_{i,j=1}^{k} ij(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_j) = k(k+1)$$

$$(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{i,j=1}^{l} ij(\boldsymbol{\beta}_i, \boldsymbol{\beta}_j) = \frac{1}{2}(l+1)l$$

$$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{l} ij(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\beta}_j) = -kl = kl\|\boldsymbol{\alpha}_k\|\,\|\boldsymbol{\beta}_l\|\cos 135^\circ$$

而

$$\frac{(\boldsymbol{\alpha\beta})^2}{(\boldsymbol{\alpha\alpha})(\boldsymbol{\beta\beta})} = \cos^2\varphi_{\alpha\beta} < 1$$

即

$$(\boldsymbol{\alpha\beta})^2 < (\boldsymbol{\alpha\alpha})(\boldsymbol{\beta\beta})$$

因此得到

$$(\boldsymbol{\alpha\beta})^2 = k^2l^2 < \frac{1}{2}k(k+1)l(l+1)$$

即

$$kl < \frac{1}{2}(k+1)(l+1) = \frac{1}{2}(kl+k+l+1)$$

由此得到

$$(k-1)(l-1) < 2$$

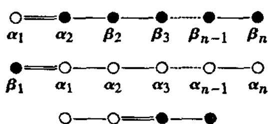
这个不等式的正整数解只有三种：

(1) $k=1$，l 为任意正整数；

(2) $l=1$，k 为任意正整数；

(3) $l=k=2$.

因而形如 Dynkin 图(c)的单 Dynkin 图只有三种：



前两种分别为典型 Lie 代数 C_n 和 B_n 的 Dynkin 图，第三种为例外 Lie 代数 F_4 的 Dynkin 图.

下面讨论前边给出的(d)形图的允许结构. 与(c)形图的讨论相类似，令

$$\boldsymbol{\alpha} = \sum_{i=1}^{l-1} i\boldsymbol{\alpha}_i, \quad \boldsymbol{\beta} = \sum_{i=1}^{q-1} j\boldsymbol{\beta}_j, \quad \boldsymbol{\gamma} = \sum_{k=1}^{r-1} k\boldsymbol{\gamma}_k$$

于是得到

$$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}(l-1)l, \qquad (\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}q(q-1)$$

$$(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\gamma}) = \frac{1}{2}r(r-1)l, \qquad (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_l) = -\frac{1}{2}(l-1)$$

$$(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha}_l) = -\frac{1}{2}(q-1), \qquad (\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\alpha}_l) = -\frac{1}{2}(r-1)$$

由此得到

$$\cos^2\varphi_{\alpha, \alpha_l} = \frac{(\alpha_1\alpha_2)^2}{(\alpha, \alpha)(\alpha_l, \alpha_l)} = \frac{\left[-\frac{1}{2}(l-1)\right]^2}{\frac{1}{2}l(l-1)} = \frac{1}{2}(1 - l^{-1})$$

$$\cos^2\varphi_{\beta, \alpha_l} = \frac{1}{2}(r - q^{-1}), \qquad \cos^2\varphi_{\gamma, \alpha_l} = \frac{1}{2}(r - r^{-1})$$

由于 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}$ 相互正交，因而有

$$\cos^2\varphi_{\alpha, \alpha_l} + \cos^2\varphi_{\beta, \alpha_l} + \cos^2\varphi_{\gamma, \alpha_l} < 1$$

由此得到

$$\frac{1}{2}[3 - (l^{-1} + q^{-1} + r^{-1})] < 1$$

即

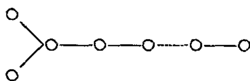
$$l^{-1} + q^{-1} + r^{-1} > 1$$

令 $l \geqslant q \geqslant r$，则 $l^{-1} \leqslant q^{-1} \leqslant r^{-1}$. 于是 $3r^{-1} > 1$. 这要求 $r \geqslant 2$. 取 $r = 2$，则满足上述不等式的整数解只有

$$r = 2, \quad q = 2, \quad l \geqslant 2$$

$$r = 2, \quad q = 3, \quad 3 \leqslant l \leqslant 5$$

第一种解是典型 Lie 代数 D_n 的 Dynkin 图，它为

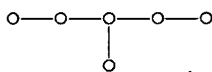


$$(r = 2, \ q = 2, \ l \geqslant 2)$$

$$n(r-1) + (q-1) + (l-1) + 1 = l + 2 \geqslant 4$$

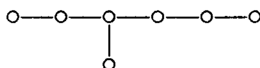
当 $n = 3$ 时，Dynkin 图变为 ○—○ . 因而 $D_3 \simeq A_3$.

第二种解为 $r=2$，$q=3$，$l=3$，Dynkin 图为



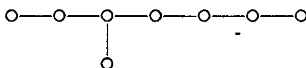
它是例外 Lie 代数 E_6 的 Dynkin 图.

第三种解为 $r=2$，$q=3$，$l=4$，Dynkin 图为



它对应例外 Lie 代数 E_7.

最后一种解为 $r=2$，$q=3$，$l=5$，Dynkin 图为



相应 Lie 代数为 E_8.

这样利用单 π 系 Dynkin 图的分析得到了单 Lie 代数只有四个系列的典型 Lie 代数 A_n，$B_n(n\geqslant 2)$，$C_n(n\geqslant 3)$，$D_n(n\geqslant 4)$.（因为 $B_1\approx A_1$，$C_2\approx B_2$，$D_2\approx A_2$，$D_3\approx A_3$）和 5 个例外 Lie 代数 G_2，F_4，E_6，E_7，E_8.

下表给出了它们的 Dynkin 图.

单 Lie 代数	Dynkin 图	秩数	阶数
A_n		n	$n(n+2)$
B_n		n	$n(2n+1)$
C_n		n	$n(2n+1)$
D_n		n	$n(2n-1)$
G_2		2	14
F_4		4	52
E_6		6	78
E_7		7	133
F_8		8	248

在表 9.7.1 中列出了全部单 Lie 代数的非零根和素根.

表 9.7.1　单纯 Lie 代数的根系

Lie 代数	秩	非　零　根	非零根数	素　数	阶	根归一化常数
A_n	n	$e_i - e_j$, $1 \leqslant i,\ j \leqslant n+1$	$n(n+1)$	$e_i - e_{i+1}$ $(i=1,\cdots,n)$	$n(n+2)$	$[2(n+1)]^{-1/2}$
B_n	n	$\pm e_i \pm e_j$, $\pm e_i$ $1 \leqslant i,\ j \leqslant n$	$2n^2$	$e_i - e_{i+1}$, e_n $(i=1,\cdots,n-1)$	$n(2n+1)$	$[2(2n-1)]^{-1/2}$
C_n	n	$\pm e_i \pm e_j$, $\pm 2e_i$ $1 \leqslant i,\ j \leqslant n$	$2n^2$	$e_i - e_{i+1}$, $2e_n$ $(i=1,\cdots,n-1)$	$n(2n+1)$	$[2(2n+2)]^{-1/2}$
D_n	n	$\pm e_i \pm e_j$ $1 \leqslant i,\ j \leqslant n$	$2n(n-1)$	$e_i - e_{i+1}$ $e_{n-1} + e_n$ $(i=1,\cdots,n-1)$	$n(2n-1)$	$[2(2n-2)]^{-1/2}$
G_2	2	$e_i - e_j$ $\pm(e_i + e_j) \mp 2e_k$, $(1 \leqslant ij,\ k \leqslant 3)$	12	$-e_i + 2e_2 - e_3$ $e_1 - e_2$	14	$[24]^{-1/2}$
F_4	4	$\pm e_i \pm e_j$, $\pm e_i$, $(1 \leqslant i,\ j \leqslant 4)$ $\frac{1}{2}(\pm e_1$ $\pm e_2 \pm e_3 \pm e_4)$	48	$e_1 - e_2$, $e_2 - e_3$, e_3 $\frac{1}{2}(e_4 - e_1 - e_2 - e_3)$	52	$\frac{1}{6}^{1/2}$
E_6	6	$e_i - e_j$ $(1 \leqslant i \neq j \leqslant 6)$, $\pm\sqrt{2}e_7$ $\frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2$ $\pm e_3 \pm e_4 \pm e_5$ $\pm e_6) \pm \frac{e_7}{\sqrt{2}}$ 取 3 个正号, 3 个负号	72	$e_i - e_{i+1}$ $(i=1,2,\cdots,5)$ $\frac{1}{2}(-e_1 - e_2 - e_3 +$ $e_4 + e_5 + e_6 + \sqrt{2}e_7)$	78	$[24]^{-1/2}$
E_7	7	$e_i - e_j$ $(1 \leqslant i,\ j \leqslant 8)$, $\frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2$ $\pm e_3 \pm e_4 \pm e_5$ $\pm e_6 \pm e_7 \pm e_8)$ 取 4 个正号, 4 个负号	126	$e_i - e_{i+1}(i=1,\cdots,6)$ $\frac{1}{2}(-e_1 - e_2 - e_3 +$ $e_4 + e_5 + e_6$ $+ e_7 - e_8)$	133	$\frac{1}{6}$

Lie 代数	秩	非零根	非零根数	素数	阶	根归一化常数
E_8	8	$\pm e_i \pm e_j$ $(1\leqslant i,\ j\leqslant 8)$, $\frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4 \pm e_5 \pm e_6 \pm e_7 \pm e_8)$ 取偶数个正号	240	$e_i - e_{i+1}$; $e_7 + e_8$ $(i=1,\cdots,6)$ $\frac{1}{2}(-e_1 - e_2 - e_3 + e_4 + e_5 + e_6 + e_7 - e_8)$	248	$[60]^{-1/2}$

9.8 复数域 C 上的一般线性 Lie 代数 $gl(n,\mathbf{C})$ 及其子代数

复数域 **C** 上所有 $n\times n$ 非奇异矩阵，在 Lie 乘积定义为

$$[X,Y]=XY-YX \tag{9.8.1}$$

$(X, Y$ 为 $n\times n$ 矩阵，XY 为矩阵乘法$)$之后构成一个 Lie 代数，称为复数域 **C** 上的一般线性变换 Lie 代数，记为 $gl(n,\mathbf{C})$.

$gl(n,\mathbf{C})$的子代数称为矩阵 Lie 代数或线性 Lie 代数，每个 $n\times n$ 矩阵可视为 n^2 维空间的向量，它代表 n 维向量空间的一个线性变换. 全部 $n\times n$ 的非奇异矩阵为 n 维空间中的全部线性变换，它们的基矢可选为

$$E_{ij}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & \overset{\text{第}i\text{列}}{0} & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}\text{第}j\text{行},\quad i,j=1,2,\cdots,n \tag{9.8.2}$$

即第 i 行第 j 列元素为 1，其它元素全部为零. 这种基矢一共是 n^2 个，称 Lie 代数 $gl(n,\mathbf{C})$的维数为 n^2.

对于任一 $n\times n$ 的矩阵 $X\in gl(n,\mathbf{C})$，都可用 n^2 个基矩阵$\{E_{ij}\}$展开为

$$X=\sum_{kl}\lambda_{kl}E_{kl},\quad \lambda_{kl}\in C$$

因而须用 $2n^2$ 个实数描述这些参数，即

$$\lambda_{kl}=\mu_{kl}+\mathrm{i}\nu_{kl}$$

因而需要 $2n^2$ 个实数描述 $gl(n,\mathbf{C})$中的矩阵，故此称 $gl(n,\mathbf{C})$中的元素是复空间 n^2 维的，也可说是实空间 $2n^2$ 维的，通常由 Lie 代数所需要的连续变化的实参数的数目表示它的维数，因而 Lie 代数 $gl(n.\ C)$是 $2n^2$ 维的.

不同基矢满足交换关系.

$$[E_{ij},E_{kl}]=\delta_{jk}E_{il}-\delta_{il}E_{kj} \tag{9.8.3}$$

公式(9.8.3)给出了 $gl(n,\mathbf{C})$的代数结构，因而它为 Lie 代数. 在这个 Lie 代数中，n 个元素

$$H_i=E_{ii},\quad i=1,2,\cdots,n$$

具有性质

$$[H_i, H_j]=0 \tag{9.8.4}$$

它们构成 $gl(n, \mathbf{C})$ 的 n 维的 Cartan 子代数，因而 $gl(n, \mathbf{C})$ 的秩为 n. n 维 Cartan 子代数全部为只有一个对角元的矩阵.

以 E 记为 $n\times n$ 的单位矩阵，称常数 $\lambda(\in\mathbf{C})$ 与 E 之积 λE 为常数矩阵. 全部常数矩阵之集合 $\{\lambda E|\lambda\in\mathbf{C}\}$ 构成 $gl(n, \mathbf{C})$ 的一个子集，这个子集构成一个子代数，因为

$$[\lambda E, \lambda' E]=0\in\{\lambda E|\lambda\in\mathbf{C}\}$$

而且这个子代数还是一个理想，因为对于任一 $X\in gl(n, \mathbf{C})$ 均有

$$[X, \lambda E]=O\in\{\lambda E|\lambda\in\mathbf{C}\}$$

这个理论还是可交换的理想. 这表明 $gl(n, \mathbf{C})$ 不是半单 Lie 代数也不是单 Lie 代数. 它的子代数包括了各种典型 Lie 代数，下面讨论这些问题.

9.8.1　特殊线性 Lie 代数 $sl(n+1, \mathbf{C})$

定义 9.8.1　特殊线性 Lie 代数 $sl(n+1, \mathbf{C})$ 是一般线性 Lie 代数 $gl(n+1, \mathbf{C})$ 的子代数，它由全部迹为 0 的 $(n+1)\times(n+1)$ 的矩阵构成，即

$$sl(n+1, \mathbf{C})=\{X\in gl(n+1, \mathbf{C})|\mathrm{tr}X=0\} \tag{9.8.5}$$

$\mathrm{tr}X=0$，即矩阵 X 的迹 $\sum_i x_{ii}=\mathrm{tr}X$ 为零.

若 $\mathrm{tr}X=0$，$\mathrm{tr}Y=0$，则

$$\mathrm{tr}[X, Y]=\sum_k\sum_j(x_{kj}y_{jk}-y_{kj}x_{jk})=0\in sl(n+1, \mathbf{C})$$

因而 $sl(n+1, \mathbf{C})$ 为一 Lie 代数. 因为任何两个非奇异矩阵 X, $Y\in gl(n+1, \mathbf{C})$，它们的 Lie 乘积 $[X, Y]$ 的迹均为 0，即

$$\mathrm{tr}[X, Y]=0 \tag{9.8.6}$$

因而若 $X\in gl(n+1, \mathbf{C})$，$Y\in sl(n+1, \mathbf{C})$，则

$$\mathrm{tr}[X, Y]=0\in sl(n+1, \mathbf{C})$$

这表明 $sl(n+1, \mathbf{C})$ 不仅是 $gl(n+1, \mathbf{C})$ 的子代数，而且还是 $gl(n+1, \mathbf{C})$ 的理想. 这样 $gl(n+1, \mathbf{C})$ 便有两个理想，$sl(n+1, \mathbf{C})$ 和 $\{\lambda I|\lambda\in\mathbf{C}\}$，因之 $gl(n+1, \mathbf{C})$ 为直和 Lie 代数.

$$gl(n+1, \mathbf{C})=sl(n+1, \mathbf{C})\oplus\{\lambda I|\lambda\in\mathbf{C}\}$$

$sl(n+1, \mathbf{C})$ 的 Cartan 子代数，即 $(n+1)\times(n+1)$ 阶的对角矩阵集合，其中的任一元素

$$H_{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{n+1}}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \lambda_n & \\ & & & & \lambda_{n+1}\end{pmatrix}$$

受到迹为零的约束，必须满足

$$\mathrm{tr}H_{\lambda_1,\lambda_1,\cdots,\lambda_n}=\sum_{i=1}^{n+1}\lambda_i=0$$

因而 $sl(n+1,\mathbf{C})$ 的 Cartan 子代数不是 $n+1$ 维的，而是 n 维的，$gl(n+1.\ C)$ 的 $n+1$ 个迹不为零的基矢 H_i，$i=1,2,\cdots,n+1$，可以组合成 n 个线性独立的迹为零的元素，它们构成 $sl(n+1.\ C)$ 的 Cartan 子代数. 当然组合方法很多，下面给出一种组合方法，即令

$$H_i=\frac{1}{i}[(i-1)E_{ii}-E_{11}-E_{22}-\cdots-E_{i-1,i-1}],\quad i=2,3,\cdots,n+1,\quad \mathrm{tr}H_i=0 \tag{9.8.7}$$

因此得到 n 个 $\mathrm{tr}H_i=0$ 的独立的对角矩阵，它们仍然满足方程(9.8.4)，因而构成了 $sl(n+1,\mathbf{C})$ 的 Cartan 子代数.

$sl(n+1,\mathbf{C})$ 的另外 $n(n+1)$ 个基矢，仍然用(9.8.2)式定义的 E_{ij}，利用 $n+1$ 维空间的正交基矢量

$$\boldsymbol{e}_i=(\overbrace{0,0,\cdots,0,1}^{i},0,\cdots,0)$$

并取 $\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j$ 来标记 E_{ij}，即

$$E_{ij}=E_{\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j},\quad E_{ji}=E_{-(\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j)},\quad i>j,\quad i,j=1,2,\cdots,n+1 \tag{9.8.7'}$$

阶数(即包含的基矢数目)为 $n(n+1)+n=n(n+2)$ 或 Lie 代数 $sl(n,\mathbf{C})$ 的阶数为 $n(n-1)$，相应 Lie 群 $SL(n.\ C)$ 的实维数为 $2n(n+2)$.

向量

$$\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j=(\underbrace{\overbrace{0,0,\cdots0,-1}^{j},0,\cdots,0,1}_{i},0,\cdots,0),\text{即}(\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j)_k=\delta_{ik}-\delta_{jk}$$

共有$\frac{n(n+1)}{2}$个，加上 $-(\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j)$，一共有 $n(n+1)$个. 这些向量都是 $n+1$ 维实空间中 n 维超平面上的向量，称这个超平面为 Lie 代数 $sl(n+1,\mathbf{C})$ 的根空间，是 Cartan 子空间的对偶空间，$n(n+1)$个向量 $\pm(\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j)$为根向量.

于是利用(9.8.3)式可得到

$$[H_i,H_j]=0$$

$$[H_k,E_{\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j}]=\delta_{ki}E_{\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j}-\delta_{kj}E_{\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j}=(\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j)_kE_{\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j}$$

或一般地写为

$$[H_k,E_\alpha]=\alpha_kE_\alpha$$

$\boldsymbol{\alpha}$ 为根向量 $\pm(\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j)$，$\alpha_k$ 为 $\boldsymbol{\alpha}$ 的 k 分量.

$$[E_{\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j},E_{\boldsymbol{e}_k-\boldsymbol{e}_l}]=\delta_{jk}E_{\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_l}-\delta_{il}E_{\boldsymbol{e}_k-\boldsymbol{e}_j}$$

这表明如果

$$\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k-\boldsymbol{e}_l$$

仍然为根向量 $\boldsymbol{e}_p-\boldsymbol{e}_q$，这只有两种可能，或者 $\boldsymbol{e}_j=\boldsymbol{e}_k$，此时

$$\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k-\boldsymbol{e}_l=\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_l$$

或者 $\boldsymbol{e}_i=\boldsymbol{e}_l$，此时

$$\boldsymbol{e}_i-\boldsymbol{e}_j+\boldsymbol{e}_k-\boldsymbol{e}_l=\boldsymbol{e}_k-\boldsymbol{e}_j$$

因而上式可用根 α, β 表示为

$$[E_\alpha, E_\beta] = \pm E'_{\alpha+\beta}$$

对于

$$[E_{e_i-e_j}, E_{-e_i+e_j}] = E_{ii} - E_{jj} = H_i - H_j = (e_i - e_j)_k H_k$$

(注意重复脚标表示求和)因而 $sl(n+1, \mathbf{C})$ 的 Lie 代数结构为:

$$\begin{cases} [H_i, H_j] = 0 \\ [H_i, E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha \\ [E_\alpha, E_\beta] = \begin{cases} \pm E'_{\alpha+\beta} = N_{\alpha\beta} E_{\alpha+\beta}, & \text{若 } \alpha+\beta \text{ 是根} \\ 0, & \text{若 } \alpha+\beta \text{ 不是根} \end{cases} \\ [E_\alpha, E_{-\alpha}] = \alpha_i H_i \end{cases} \tag{9.8.8}$$

从而说明基矢

$$\{E_\alpha = E_{e_i-e_j}, i, j = 1, 2, \cdots, n+1\ (i > j); H_i, i = 2, \cdots, n+1\}$$

构成 $sl(n+1, \mathbf{C})$ 的 C-W 基.

上述讨论说明 $sl(n+1, \mathbf{C})$ 的根系与典型 Lie 数 A_n 的根系是相同的，因而它们相互同构，即

$$sl(n+1, \mathbf{C}) \simeq A_n$$

或者说，A_n 作为线性变换 Lie 代数，它由 $(n+1) \times (n+1)$ 的全部迹零矩阵构成，Cartan 子空间由全部迹零的对角矩阵构成.

如果 $(n+1) \times (n+1)$ 的矩阵为定义在实数域 $\mathbf{R}$ 上的实矩阵，可得 Lie 代数 $gl(n+1, \mathbf{R})$. 它的阶也是 $(n+1)^2$，它的子代数 $sl(n+1, \mathbf{R})$ 的基矢仍然为

$$\{H_i, i = 2, \cdots, n+1; E_{ij}, i, j = 1, 2, \cdots, n+1\}$$

共 $n(n+2)$ 个，阶数仍为 $n(n+2)$，只是任一矩阵 $X \in sl(n+1, \mathbf{R})$ 为

$$X = \sum_i \lambda_i H_i + \sum_{jl} \lambda_{jl} E_{jl}, \quad \lambda_i, \lambda_{jl} \in \mathbf{R}$$

只须 $n(n+2)$ 个实数，因而维数也为 $n(n+2)$.

9.8.2 正交 Lie 代数 $o(m, \mathbf{C})$ 和特殊正交 Lie 代数 $so(m, \mathbf{C})$

正交 Lie 代数 $o(m, \mathbf{C})$ 是 $gl(m, \mathbf{C})$ 的子代数，它由反对称矩阵构成. 一个矩阵 A，记它的转置矩阵为 $\tilde{A}$，即，如果 a_{ij} 为矩阵 A 的矩阵元，$\tilde{A}$ 的矩阵元 $\tilde{a}_{ij} = a_{ji}$. 如果满足条件

$$A = -\tilde{A} \quad (\text{即 } a_{ij} = -a_{ji}) \tag{9.8.9}$$

则称 A 为反对称矩阵. 显然反对称矩阵是迹零矩阵，即 $\mathrm{tr}A = 0$. 若 $\tilde{A} = -A$，而且全部反对称矩阵构成 $sl(m, \mathbf{C})$ 的一个子代数，若 A, B 均为反对称矩阵，则

$$\mathrm{tr}[A, B] = 0, \ \lambda A + \mu B = C, \qquad \widetilde{\lambda A + \mu B} = \tilde{C} = -C \tag{9.8.10}$$

因而 $m \times m$ 的全部复反对称矩阵构成一全封闭的 Lie 代数，它是 $gl(m, \mathbf{C})$ 的子代数，称为复正交 Lie 代数，记为 $o(m, \mathbf{C})$. 即

$$o(m, \mathbf{C}) = \{A \in gl(m, \mathbf{C}) \mid A + \tilde{A} = 0\} \tag{9.8.11}$$

由于反对称性要求，$o(m,\ \mathbf{C})$ 有 $\frac{1}{2}m(m-1)$ 个基矢，可以取它们为

$$I_{ij}=E_{ij}-E_{ji},\quad i\neq j,\quad i,j=1,2,\cdots,m$$

$$\tilde{I}_{ij}=-I_{ij} \tag{9.8.12}$$

I_{ij} 为 $m\times m$ 的反对称矩阵，由(9.8.3)式容易得到

$$[I_{ij},\ I_{kl}]=\delta_{il}I_{jk}+\delta_{jk}I_{il}-\delta_{ik}I_{jl}-\delta_{jl}I_{ik} \tag{9.8.13}$$

这就是 $o(m,\ \mathbf{C})$ 的代数结构.

下面分两种情况对 $o(m,\ \mathbf{C})$ 进行讨论.

1. $m=2n+1$，阶数 $\frac{m}{2}(m-1)=n(2n+1)$

选 $o(m,\ \mathbf{C})$ 的基矢为

$$\begin{cases}H_j=\mathrm{i}I_{2j,\,2j-1},\quad j=1,2,\cdots,n\\ E_{e_j\pm e_k}=\frac{1}{2}[\mathrm{i}(I_{2k-1,\,2j-1}\mp I_{2k,\,2j})-(I_{2k-1,\,2j}\pm I_{2k,\,2j-1})]\\ E_{-(e_j\pm e_k)}=\frac{1}{2}[\mathrm{i}(I_{2k-1,\,2j-1}\mp I_{2k,\,2j})+(I_{2k-1,\,2j}\pm I_{2k,\,2j-1})]\\ E_{\pm e_j}=\sqrt{\frac{1}{2}}(\mathrm{i}I_{2n+1,\,2j}\pm I_{2n+1,\,2j-1})\\ \qquad j<k,\quad j,k=1,2,\cdots,n\end{cases} \tag{9.8.14}$$

注意上式中 $\mathrm{i}=\sqrt{-1}$ 为虚数单位. (9.8.14)定义的基矢共 $n+\frac{n(n-1)}{2}+\frac{n(n-1)}{2}+2n=n(2n+1)$ 个，它们全部为 $(2n+1)\times(2n+1)$ 的反对称矩阵.

其中标记基矢 E 的向量为 $\{\pm(\boldsymbol{e}_j\pm\boldsymbol{e}_k),\ \pm\boldsymbol{e}_j,\ j,k=1,2,\cdots,n\}$，实际上是典型 Lie 代数 B_n 的根. 因而正交 Lie 代数 $o(2n+1,\ \mathbf{C})$ 与典型 Lie 代数 B_n 同构. 由交换关系(9.8.3)可证明(9.8.14)式所给出的基矢是 $o(2n+1,\ \mathbf{C})$ 的 C-W 基.

2. $m=2n$ 为偶数，阶数 $\frac{m}{2}(m-1)=n(2n-1)$.

选择基矢

$$\begin{cases}H_j=\mathrm{i}I_{2j,\,2j-1},\quad j=1,2,\cdots,n\\ E_{e_j\pm e_k}=\frac{1}{2}[\mathrm{i}(I_{2k-1,\,2j-1}\mp I_{2k,\,2j})-(I_{2k-1,\,2j}\pm I_{2k,\,2j-1})]\\ E_{-(e_j\pm e_k)}=\frac{1}{2}[\mathrm{i}(I_{2k-1,\,2j-1}\mp I_{2k,\,2j})+(I_{2k-1,\,2j}\pm I_{2k,\,2j-1})]\\ \qquad j<k,\quad j,k=1,2,\cdots,n\end{cases} \tag{9.8.15}$$

它们的根 $\pm(\boldsymbol{e}_j\pm\boldsymbol{e}_k)$ 与典型 Lie 代数 D_n 是一致的，因而 $o(2n,\ \mathbf{C})$ 同构于典型 Lie 代数 D_n.

(9.8.15)式给出的基矢是 $o(2n,\ \mathbf{C})$ 也就是 D_n 的 C-W 基.

9.8.3 辛 Lie 代数 $Sp(2n,\ \mathbf{C})$

$2n\times 2n$ 的矩阵

$$J=\begin{pmatrix} O & E_{n\times n} \\ -E_{n\times n} & O \end{pmatrix}$$

为一反对称矩阵，其中 $E_{n\times n}$为 $n\times n$ 的单位矩阵. 如果 $2n\times 2n$ 的矩阵 A 满足

$$\tilde{A}J+JA=0 \tag{9.8.16}$$

则称 A 为反辛矩阵.

设 A 为

$$A=\begin{pmatrix} d & e \\ f & -\tilde{d} \end{pmatrix}$$

其中 d, e, f 为 $n\times n$ 矩阵，而且 $e=\tilde{e}$, $f=\tilde{f}$，于是

$$\tilde{A}=\begin{pmatrix} \tilde{d} & f \\ e & -d \end{pmatrix}$$

则

$$\tilde{A}J=\begin{pmatrix} \tilde{d} & f \\ e & -d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & E_{n\times n} \\ -E_{n\times n'} & 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -f & \tilde{d} \\ d & e \end{pmatrix}$$

$$JA=\begin{pmatrix} 0 & E_{n\times n} \\ -E_{n\times n} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d & e \\ f & -\tilde{d} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} f & -\tilde{d} \\ -d & -e \end{pmatrix}=-\tilde{A}J$$

因而 $2n\times 2n$ 的反辛矩阵均具有矩阵 A 的形式.

辛代数 $sp(2n, \mathbf{C})$ 为

$$sp(2n,\ \mathbf{C})=\{A\in gl(2n,\ \mathbf{C})\mid \tilde{A}J+JA=0\} \tag{9.8.17}$$

容易看到，若 A_1, $A_2\in sp(2n, \mathbf{C})$，即

$$A_1=\begin{pmatrix} d_1 & e_1 \\ f_1 & -\tilde{d}_1 \end{pmatrix},\quad A_2=\begin{pmatrix} d_2 & e_2 \\ f_2 & -\tilde{d}_2 \end{pmatrix}$$

则

$$\begin{aligned}
&[A_1,\ A_2]\\
&=A_1A_2-A_2A_1\\
&=[d_1d_2+e_1f_2-d_2d_1-e_2f_1,\ d_1e_2-e_1\tilde{d}_2-d_2e_1+e_2\tilde{d}_1\\
&\quad f_1d_2-\tilde{d}_1f_2-d_2d_1+\tilde{d}_2f_1,\ f_1e_2+\tilde{d}_1\tilde{d}_2-f_2e_1-\tilde{d}_2\tilde{d}_1]\\
&=C=\begin{pmatrix} d & e \\ f & g \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
d&=d_1d_2+e_1f_2-d_2d_1-e_2f_1\\
e&=d_1e_2-e_1\tilde{d}_2-d_2e_1+e_2\tilde{d}_1\\
f&=f_1d_2-\tilde{d}_1f_2-f_2d_1+\tilde{d}_2f_1
\end{aligned}$$

$$g = f_1 e_2 + \tilde{d}_1 \tilde{d}_2 - f_2 e_1 - \tilde{d}_2 \tilde{d}_1$$

根据 $e_1 = \tilde{e}_1$, $f_1 = \tilde{f}_1$, $e_2 = \tilde{e}_2$, $f_2 = \tilde{f}_2$ 和 $(\widetilde{ab}) = \tilde{B}\tilde{A}$ 可得到

$$\tilde{d} = \tilde{d}_2 \tilde{d}_1 + f_2 e_1 - \tilde{d}_1 \tilde{d}_2 - f_1 e_2 = -d$$

$$\tilde{e} = e_2 \tilde{d}_1 - d_2 e_1 - e_1 \tilde{d}_2 + d_1 e_2 = e$$

$$\tilde{f} = \tilde{d}_2 f_1 - f_2 d_1 - \tilde{d}_1 f_2 + f_1 \tilde{d}_2 = f$$

从而证明 C 也是反辛矩阵，即 $sp(2n, \mathbf{C})$ 为 Lie 代数.

可选它的基矢为

$$\begin{cases} H_j = E_{jj} - E_{n+j,\, n+j}, \quad j = 1, 2, \cdots, n \\ E_{e_j+e_k} = E_{j,\, n+k} + E_{k,\, n+j} \\ E_{e_j-e_k} = -E_{jk} + E_{n+k,\, n+j}, \quad j < k, \quad j, k = 1, 2, \cdots, n \\ E_{-(e_j+e_k)} = E_{n+k,\, j} + E_{n+j,\, k} \\ E_{-(e_j-e_k)} = -E_{kj} + E_{n+j,\, n+k} \\ E_{2e_j} = \sqrt{2} E_{j,\, n+j} \\ E_{-2e_j} = \sqrt{2} E_{n+j,\, j} \end{cases} \tag{9.8.18}$$

容易看到这些基矢都是最基本的反辛矩阵.

向量集合 $\{\pm(\boldsymbol{e}_j \pm \boldsymbol{e}_k),\ \pm 2\boldsymbol{e}_j,\ \ j<k_j,\ \ j, k = 1, 2, \cdots, n\}$ 为典型 Lie 代数 C_n 的根系. 由交换关系(9.8.3)可以证明基矢(9.8.18)是 $sp(2n, \mathbf{C})$ 的 C-W 基，它们的 Lie 代数与以根系 $\{\pm(\boldsymbol{e}_i \pm \boldsymbol{e}_j),\ \pm 2\boldsymbol{e}_j\}$ 标记的典型 Lie 代数 C_n 是同构的，因而 $sp(2n, \mathbf{C})$ 与 C_n 同构.

由上述讨论可看到，四类典型 Lie 代数，实际上是由四类不同线性变换所构成的四类线性 Lie 代数或称矩阵 Lie 代数. A_n 为 $n+1$ 维复空间迹零矩阵所构成的矩阵 Lie 代数；B_n 为 $2n+1$ 维复空间反对称矩阵所构成的正交变换 Lie 代数；D_n 为 $2n$ 维复空间反对称矩阵所构成的正交变换 Lie 代数；C_n 是 $2n$ 维复空间的反辛变换所构成的辛代数.

9.8.4 $gl(n, \mathbf{C})$ 的子代数 $u(n)$ 和 $su(n)$

定义 $n \times n$ 的矩阵 A 的厄米共轭矩阵为 A^+

$$A^+ = \tilde{A}^*$$

如果矩阵 $A = -\tilde{A}^+$，称为反 Hermition 矩阵. 全部反 Hermition 矩阵构成一个 Lie 代数，因为若 $A^+ = -A$, $B^+ = -B$, 则

$$\begin{aligned} [A, B] &= AB - BA = A^+ B^+ - B^+ A^+ \\ &= (BA)^+ - (AB)^+ = -(AB - BA)^+ \\ &= -[A, B]^+ \end{aligned}$$

这表明$[A, B]$也是反 Hermition 矩阵，因而全部反 Hermition 矩阵在 Lie 乘积下是封闭的. 称这个 Lie 代数为酉 Lie 代数，记为 $u(n)$，即

$$u(n) = \{A \in gl(n, \mathbf{C}) \mid A^+ + A = 0\} \tag{9.8.19}$$

显然纯量矩阵 $\mathrm{i}\lambda I_{n\times n}$是反 Hermition 矩阵，而

$$[\mathrm{i}\lambda_1 E_{n\times n},\ \mathrm{i}\lambda_2 E_{n\times n}] = 0$$

这表明全部纯量矩阵$\{\mathrm{i}\lambda I_{n\times n}\}$构成 $u(n)$代数的一个可交换理想，因而 $u(n)$和 $gl(n, \mathbf{C})$一样，也不是单 Lie 代数. 它的子代数称为特殊酉 Lie 代数，记为 $su(n)$，它为

$$su(n) = \{A \in u(n) \mid \mathrm{tr}A = 0\} \tag{9.8.20}$$

即 Lie 代数 $su(n)$由全部 $n\times n$ 的迹零的反 Hermition 矩阵构成，它是 $gl(n, \mathbf{C})$和 $sl(n, \mathbf{C})$的子代数.

$gl(n, \mathbf{C})$的 C-W 基为 E_{ij}，Cartan 子代数为 $H_i = E_{ii}$，现在令

$$\begin{cases} K_j = \mathrm{i}(E_{jj} - \dfrac{1}{n}E_{n\times n}), & j = 1, 2, \cdots, n-1 \\ L_{kl} = E_{kl} - E_{lk}, & k < l, \quad k, l = 1, 2, \cdots, n \\ L_{kl}{}' = \mathrm{i}(E_{kl} + E_{lk}), & k < l, \quad k, l = 1, 2, \cdots, n \end{cases} \tag{9.8.21}$$

显然

$$K_j^+ = -K_j, \quad L_{kl}^+ = -L_{kl}, \quad L_{kl}^{+\prime} = -L_{kl}'$$

而 n^2 一个基本矩阵 H_j，L_{kl}，L_{kl}'都是迹为零的反 Hermition 矩阵，它们构成 $su(n)$的基矢. 容易看到

$$\begin{aligned}
[K_j, K_k] &= 0 \\
[K_j, K_{kl}] &= (\delta_{jk} - \delta_{jl})L_{kl}' \\
[K_j, K_{kl}'] &= (\delta_{jl} - \delta_{jk})L_{kl} \\
[L_{kl}, L_{pq}] &= \delta_{lp}L_{kq} - \delta_{lq}L_{kq} - \delta_{kp}L_{lq} + \delta_{kq}L_{lq} \\
[L_{kl}', L_{pq}'] &= -\delta_{lp}L_{kq} - \delta_{lq}L_{kq} - \delta_{kp}L_{lq} - \delta_{kq}L_{lq} \\
[L_{kl}, L_{pq}'] &= \delta_{lp}L_{kq}' + \delta_{lq}L_{kq}' - \delta_{kp}L_{lq}' - \delta_{kq}L_{lq}'
\end{aligned}$$

可见(9.8.20)式给出了 $su(n)$的一组基矢，但不是 C-W 基.

而(9.8.21)式给出的 Lie 代数 $su(n)$的基矢为 Lie 代数 $sl(n, \mathbf{C})$的基矢的线性组合. 因而 $su(n)$与 $sl(n, \mathbf{C})$同态，这也说明了 $su(n+1)$与典型 Lie 代数 A_n 同态. $su(n)$中的任一元素 X 用基矢(9.8.21)可表示为

$$\begin{aligned}
X &= \alpha_j K_j + \mu_{kl}L_{kl} + \mu_{kl}'L_{kl}' \\
&= \mathrm{i}\alpha_j H_j + (\mu_{kl} + \mathrm{i}\mu_{kl}')E_{kl} - (\mu_{kl} - \mathrm{i}\mu_{kl}')E_{lk}
\end{aligned}$$

为了保证 X 是反厄米矩阵，要求 α_j，μ_{kl}，μ_{kl}'为实数. 而 $sl(n, \mathbf{C})$的任意元素，则无这种要求.

因而 Lie 代数 $sl(n, \mathbf{C})$对应的 Lie 群 $SL(n, \mathbf{C})$与 Lie 代数 $su(n)$对应的 Lie 群$SU(n)$只是局部同构，整体性质并不相同. $SU(n)$群为紧致 Lie 群，$SL(n, \mathbf{C})$是非紧致 Lie 群.

9.8.5　Lie 代数 $gl(n, \mathbf{C})$及其子代数小结

n 维复空间中的 $n\times n$ 矩阵，如果定义 Lie 乘积为矩阵的交换关系，即 Lie 乘积为

$$[A, B] = AB - BA$$

则全部 $n \times n$ 矩阵集合 $\{A\}$ 构成 n 维复空间的 Lie 代数，称为复数域 **C** 上的一般线性代数，记为 $gl(n, \mathbf{C})$. 它有半单的子代数，这些子代数包括了全部典型 Lie 代数. 下面把这些子代数列入表 9.8.1 中.

表 9.8.1 $gl(n, \mathbf{C})$ 及其子代数

Lie 代数	阶数	秩数	结 构
$gl(n, \mathbf{C})$	n^2	n	全部 $n \times n$ 的复数矩阵
$sl(n, \mathbf{C}) \simeq A_{n-1}$	$n^2 - 1$	$n - 1$	$sl(n, \mathbf{C}) = \{A \in gl(n, \mathbf{C}) \mid \mathrm{tr}A = 0\}$
$o(n, \mathbf{C})$ 当 $n = 2m+1$ 时，$(2m+1, \mathbf{C}) \simeq B_m$ 当 $n = 2m+1$ 时，$O(2m, \mathbf{C}) \simeq D_m$	$\frac{n(n-1)}{2}$	m	$o(n, \mathbf{C}) = \{A \in gl(n, \mathbf{C}) \mid \tilde{A} + A = 0\}$
$Sp(n, \mathbf{C}) \simeq C_{\frac{n}{2}}$，$n$ 为偶数	$\frac{n}{2}(n-1)$	$\frac{n}{2}$	$Sp(n, \mathbf{C}) = \{A \in gl(n, \mathbf{C}) \mid \tilde{A}J + JA = 0\}$
$u(n)$	n^2	n	$u(n) = \{A \in gl(n, \mathbf{C}) \mid A + A^{+} = 0\}$
$su(n)$	$n^2 - 1$	$n - 1$	$su(n) = \{A \in u(n) \mid \mathrm{tr}A = 0\}$
$Sp(n)$，n 为偶数	$\frac{n}{2}(n+1)$	$\frac{n}{2}$	$Sp(n) = \{A \in gl(n, \mathbf{C}) \mid \tilde{A}J + JA = 0$ $A + \tilde{A} = 0\}$
$gl(n, \mathbf{R})$	n^2	n	全部实的 $n \times n$ 的矩阵
$sl(n, \mathbf{R})$	$n^2 - 1$	$n - 1$	$sl(n, \mathbf{R}) = \{A \in gl(n, \mathbf{R}) \mid \mathrm{tr}A = 0\}$
$o(n)$，$n = 2m+1$ 或 $2m$	$\frac{n}{2}(n-1)$	m	$o(n) = \{A \in gl(n, \mathbf{R}) \mid \tilde{A} + A = 0\}$
$Sp(n, \mathbf{R})$	$\frac{1}{2}n(n+1)$	$\frac{n}{2}$	$Sp(n, \mathbf{R}) = \{A \in gl(n, \mathbf{R}) \mid \tilde{A}J + JA = 0\}$

在表 9.8.1 中 Lie 代数的阶数 N 为该 Lie 代数所包括的基矢数目. 对于复 Lie 代数，任一元素都可用 N 个复数表示成基矢的线性组合，即阶数是复数的维数，因而也可称这个 Lie 代数是 $2N$ 维的(指实数维数)，对实 Lie 代数阶数就是它的实维数.

$gl(n, \mathbf{C})$ 的子代数除 $o(n, \mathbf{C})$ 或 $o(n, \mathbf{R}) = o(n)$ 外，还有 $so(n, \mathbf{C})$ 或 $so(n, \mathbf{R}) = so(n)$，它们为

$$so(n, \mathbf{C}) = \{A \in gl(n, \mathbf{C}) \mid \tilde{A} + A = 0, \ \mathrm{tr}A = 0\}$$

$$so(n) = \{A \in gl(n, \mathbf{R}) \mid \tilde{A} + A = 0, \ \mathrm{tr}A = 0\}$$

因为反对称矩阵 $A(A + \tilde{A} = 0)$ 本身就是迹零矩阵 $\mathrm{tr}A = 0$，因而

$$so(n, \mathbf{C}) \cong o(n, \mathbf{C}), \quad so(n) \cong o(n)$$

只是它们的定义域不同，因而连通性不同，$so(n)$ 为单连通的，$o(n)$ 有两个连通的区域. 因此在前表中没有列出它们.

表中 J 为反对称矩阵，它的定义为

$$J = \begin{pmatrix} O & E_{n \times n} \\ -E_{n \times n} & O \end{pmatrix}$$

其中 $I_{n \times n}$ 为 $n \times n$ 的单位矩阵，因而 J 为 $2n \times 2n$ 的矩阵，它的矩阵元具有反对称性. 满足

条件

$$J A+\tilde{A} J=0$$

的矩阵称反辛矩阵(symlectic)，因而 Lie 代数 $Sp(2n, \mathbf{C})$ 或 $Sp(2n, \mathbf{R})$ 分别为复的或实的辛代数(symlectic algebra)，Lie 代数 $Sp(2n)$ 受两个约束，即 $\tilde{A}J+JA=0$ 和 $\mathrm{tr}A=0$，第一个约束表明它是反辛矩阵，第二个约束表明它是反对称矩阵，而实的反对称矩阵也称为实的酉矩阵. 因而，相应地称 Lie 代数 $Sp(2n)$ 为酉辛代数(unitary symplectic algebra).

9.9　典型 Lie 代数的紧致实形

9.9.1　实 Lie 代数的复扩充与复 Lie 代数的实形

如果在实数域 $\mathbf{R}$ 上定义一个 Lie 代数 g，称之为实 Lie 代数 g. 如果 g 的阶为 n，令 $\{X_i, i=1, 2, \cdots, n\}$ 为 g 的基矢，则 g 中任一元素 X 可表示为

$$X=x_i X_i, \quad x_i \in \mathbf{R}$$

(注意对重复脚标求和)，Lie 代数 g 的性质由 n^3 个结构常数 $\{C_{ij}^k\}$ 决定，即

$$[X_i, X_j]=C_{ij}^k X_k$$

现在把它推广到复数域 $\mathbf{C}$，则得到一个复 Lie 代数 g^*，g^* 中任一元素为

$$Z=z_j X_j, \quad z_j \in \mathbf{C}$$

这个复 Lie 代数基矢 $\{X_i, i=1, 2, \cdots, n\}$ 也是实 Lie 代数 g 的基矢，因而 g 与 g^* 有相同的结构常数 C_{ij}^k，称复 Lie 代数 g^* 为实 Lie 代数 g 的复扩充.

因为 z_j 为复数，令它为

$$z_j=x_j+\mathrm{i} y_j$$

于是

$$Z=x_j X_j+\mathrm{i} y_j X_j=X+\mathrm{i} Y$$

$$X=x_j X_j, \quad Y=y_j X_j$$

这表明复 Lie 代数 g^* 的任一元素都可表示为 $X+\mathrm{i}Y$ 的形式.

下面证明实 Lie 代数 g 的任一组基矢 $(X_i, i=1, 2, \cdots, n)$，也是它的复扩充 g^* 的一组基矢.

因为 $\{X_1, X_2, \cdots, X_n\}$ 是 g 的基矢，g 中的元素 X 和 Y 为

$$X=x_j X_j, \quad Y=y_j X_j$$

因而 g^* 中任一元素 $X+\mathrm{i}Y$ 都可表示为

$$X+\mathrm{i} Y=x_j X_j+\mathrm{i} y_j X_j=(x_j+\mathrm{i} y_j) X_j$$

因而 g^* 中任一元素都可表示为 $\{X_j\}$ 的线性组合，只是组合系数为复数 $(x_j+\mathrm{i}y_j)$ 而已. 因而基矢 $\{X_i, i=1, 2, \cdots, n\}$ 也是 g^* 的基矢. 基矢 $\{X_i, i=1, 2, \cdots, n\}$ 对实数域是线性无关的，即

$$\sum_i \alpha_i X_i \neq 0, \quad \text{对任意 } \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$$

当然

$$\sum_j(\alpha_j+\mathrm{i}\beta_j)X_j=\sum_j\alpha_jX_j+\mathrm{i}\sum_j\beta_jX_j\neq 0$$

也就是说$\{X_i,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ n\}$对于复数域也是线性无关. 因而它们也是$g^*$的基矢.

如果复 Lie 代数g^*是实 Lie 代数g的复扩充，则g是g^*的实的子 Lie 代数，称g为g^*的实形. 一定要注意，复 Lie 代数g^*的实形并不简单是g^*的实子 Lie 代数，而必须是g的复扩充等于g^*.

因而并不是所有复 Lie 代数都有它的实形，因为并不是一切复 Lie 代数都是由一定实 Lie 代数复扩充而得到的.

一个复 Lie 代数g^*如果存在实形，也不一定只有一个，可能有几个实形，因为从这些实形进行复扩充可能都是一个复 Lie 代数，或相互同构的复 Lie 代数.

复 Lie 代数g^*存在实形的充要条件是：在这个复 Lie 代数中，可以选取一组基矢$\{X_i,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ n\}$，使得$g^*$对于这组基矢的结构常数$\{C_{ij}^k\}$全部为实数. 充分性表现为：如果复 Lie 代数$g^*$存在一组结构常数$\{C_{ij}^k\}$为实数的基矢，则利用这组基矢构造一个实 Lie 代数g，而对任意$X\in g$，都可展开为

$$X=x_iX_i,\quad X_i\in\mathbf{R}$$

这个实 Lie 代数g就是复 Lie 代数g^*的实形. 必要性是：如果复 Lie 代数g^*存在实形g，它们一定存在共同的基矢$\{X_i,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ n\}$，对于相同的基矢$\{X_i,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ n\}$当然结构常数$\{C_{ij}^k\}$也是相同的，因为$\{C_{ij}^k\}$也是实 Lie 代数$g$的结构常数，它们一定是实数.

如果对复 Lie 代数g^*引入一对一的映射σ，$\sigma g\to g^*$，并且g^*中的任一元素$X+\mathrm{i}Y$，在σ映射下为

$$X+\mathrm{i}Y\xrightarrow{\sigma}X-\mathrm{i}Y$$

映射σ具有如下性质：

$$\begin{cases}\sigma^2=1\\ \sigma(\tau_1+\tau_2)=\sigma(\tau_1)+\sigma(\tau_2)\\ \sigma(\lambda\tau)=\lambda^*\sigma(\tau),\ \lambda\in\mathbf{C}\\ \sigma[\tau_1,\ \tau_2]=[\sigma(\tau_1)+\sigma(\tau_2)]\end{cases}\tag{9.9.1}$$

称这种映射为半对合映射.

复 Lie 代数g^*在半对合映射下保持不变的元素称为不动点.

显然复 Lie 代数g^*在半对合σ映射下的不动点的全体构成复 Lie 代数g^*的实形，即实 Lie 代数g.

复 Lie 代数g^*在复共轭映射下的不动点构成了它的实形g，显然复共轭映射下的不动点是形如$X+\mathrm{i}0$的元素，因而形如$X+\mathrm{i}0$的元素子集构成g^*的实形g，$X+\mathrm{i}0\in g$.

通过上述讨论说明：

(1) 实 Lie 代数g是半单 Lie 代数的充要条件是它的复扩充 Lie 代数g^*是半单 Lie 代数.

(2) 复半单 Lie 代数的判别条件是它的 C-K 度规张量是非退化的，因而实半单 Lie 代数的判别条件也是它的度规张量是非退化的.

(3) 像复半单 Lie 代数一样，实半单 Lie 代数也可唯一地分解为它的所有(有限个)非交换理想的直和.

9.9.2　紧致实 Lie 代数

在 9.1 节中已定义了如果线性 Lie 群的所有矩阵勾西序列是收敛的，而且所有矩阵都是有界的，则称这个 Lie 群为紧致 Lie 群. 每个 Lie 群的无穷小生成元构成一个 Lie 代数，因而定义紧致 Lie 群的无穷小生成元所构成的 Lie 代数为紧致 Lie 代数. 紧致 Lie 代数也可从 Lie 代数本身的性质给出更一般的定义，但是紧致实 Lie 代数的必要充分条件为它是紧致 Lie 群无穷小生成元所构成的 Lie 代数. 由此可看到所有紧致实 Lie 代数所生成的 Lie 群都是紧致 Lie 群.

关于紧致 Lie 代数有下面几个定理是很重要的. 下面不加证明地介绍三个定理.

定理 9.9.1　半单 Lie 代数是紧致 Lie 代数的充要条件是 C-K 度规张量是负定的.

定理 9.9.2　复半单 Lie 代数 g 的任意两个紧致实形皆同构，实际上皆可通过一个内自同构使其中一个变换为另一个.

定理 9.9.3　设 g 为复半单 Lie 代数，g_0 是它的实形，σ 是相应的半对合，则：

(1) g 有一个 Cartan 子代数 h，使 $\sigma(h)=h$，$\sigma(h_0)=h_0$(h_0 为 g_0 的 Cartan 子代数)，而 σ 仅引起 h_0 的一个正交变换并引起根的一个置换.

(2) 如 g_0 紧致，则 $\sigma(H)=-H$，$H\in h$，而且 g 有一组 C-W 基 $\{E_\alpha\}$ 使 $\sigma(E_\alpha)=-E_{-\alpha}$，对一切 $\alpha\in\Sigma$.

(3) 反之，给定 g 的一组 C-W 基 $\{E_\alpha\}$，可定义 g 的一个半对和 σ 为

$$\begin{cases}\sigma(H)=-H, & 对\ H\in h_0\\ \sigma(E_\alpha)=-E_{-\alpha}, & \alpha\in\sum\end{cases}\tag{9.9.2}$$

则相应于 σ 的实形为

$$g_u=\{\sum_{i=1}^{n}\alpha_iH_{\alpha_i}+\sum_{\alpha\in\Sigma}\sigma_\alpha E_\alpha\mid\alpha_i,\ 纯虚,\ \bar{\sigma}_\alpha=-\sigma_{-\alpha}\}$$

是紧致的.

以上三个定理的证明可参阅万哲先著《李代数》.

定理 9.9.1 给出了半单紧致 Lie 代数的一个判断准则，定理 9.9.2 说明在同构意义下复半单 Lie 代数的紧致实形是唯一的. 定理 9.9.3 可作为寻求复半单 Lie 代数的紧致实形的一种方法.

9.9.3　典型 Lie 代数的紧致实形

根据定理 9.9.3 之(3)，可对典型 Lie 代数重新定义一组 C-W 基，使之在某一个半对合下符合(9.9.2)式，这样便可得到它的紧致实形.

1. 典型 Lie 代数 $A_n\simeq sl(n+1,\mathbf{C})$ 的紧致实形

(9.8.1)中已讨论了典型 Lie 代数 A_n 与特殊线性 Lie 代数 $sl(n+1,\mathbf{C})$ 同构. 而用 $(n+1)\times(n+1)$ 的矩阵作为 Lie 代数的空间，则 A_n 或 $sl(n+1,\mathbf{C})$ 是由全部迹零的 $(n+1)\times(n+1)$ 矩阵构成，它的 Cartan 子空间为

$$h = \left\{ \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & 0 & \\ & 0 & \ddots & \\ & & & \lambda_{n+1} \end{pmatrix} \middle| \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i = 0 \right\} \tag{9.9.3}$$

一组 C-W 基为

$$\{H_i,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ n; E_{e_i-e_j},\ i, j=1, 2, \cdots, n+1\}$$

其中

$$H_i = E_{ii} - \frac{1}{i}[(i-1)E_{ii} - E_{11} - E_{22} - \cdots - E_{i-1,i-1}], \quad E_{e_i-e_j} = E_{ij}$$

E_{ij}为$(n+1)\times(n+1)$的矩阵，它的矩阵元为 $e_{kl} = \delta_{ki}\delta_{lj}$.

为了得到它的紧致实形，取

$$K_j = \mathrm{i}H_j,\ L_{kl} = E_{kl} - E_{lk},\ L_{kl}' = \mathrm{i}(E_{kl} + E_{lk}) \tag{9.9.4}$$

于是

$$H_j = \mathrm{i}K_j,\ E_{kl} = \frac{1}{2}(L_{kl} - \mathrm{i}L_{lk}'),\ E_{lk} = -\frac{1}{2}(L_{kl} + \mathrm{i}L_{kl}')$$

以复共轭半对合 σ 作用，则

$$\sigma(H_j) = -H_j, \quad \sigma(E_{kl}) = -E_{lk}, \quad \sigma(E_{lk}) = -E_{kl}$$

满足定理 9.9.3 的(3)(即(9.9.2)式)，因而$\{K_j, L_{kl}, L_{kl}'\}$为它的实形的基矢，此基矢为 Lie 代数 $su(n+1)$的基矢. 这就说明了典型 Lie 代数 A_n 的紧致实形为 $su(n+1)$.

容易看到$sl(n+1, \mathbf{R})$也是A_n 的实形，但是在复共轭变换下，$\sigma(H_j) = H_j$，$\sigma(E_{kl}) = E_{kl}$，不满足定理 9.9.3 的(9.9.2)式，因而它不是紧致实形.

2. $o(2n+1, \mathbf{C})$的实形 $o(2n+1, \mathbf{R}) = o(2n+1)$

(9.8.13)式给出的 Lie 代数 $o(2n+1, \mathbf{C})$的 C-W 基，取复数共轭为半对合 σ，则

$$\sigma(H_j) = -H_j,\ \sigma(E_{e_i\pm e_k}) = -E_{(e_i\pm e_k)},\ \sigma(E_{e_j}) = -E_{e_j}$$

符合定理 9.9.3 的(9.9.2)式，因而 $o(2n+1, \mathbf{C})$的紧致实形为 $o(2n+1, \mathbf{R})$.

3. 典型 Lie 代数 $D_n \simeq o(2n, \mathbf{C})$的紧致实形 $o(2n, \mathbf{R}) = o(2n)$

由 $o(2n, \mathbf{C})$的 C-W 基(9.8.14)出发，同样可证明它的紧致实形为 $o(2n, \mathbf{R}) = o(2n)$.

4. 典型 Lie 代数 $C_n \simeq sp(2n, \mathbf{C})$的紧致实形 $sp(2n)$

可以证明典型 Lie 代数 $C_n \simeq sp(2n, \mathbf{C})$的紧致实形为酉辛 Lie 代数 $sp(2n)$，即

$$sp(2n) = \{A gl(2n, \mathbf{C}) | \tilde{A}J + JA = 0,\ A + \tilde{A} = 0\}$$

这里就不证明了.

9.9.4 典型 Lie 代数与紧致典型 Lie 群

若 Lie 群 G 的无穷小生成元$\{X_i\}$构成实 Lie 代数 g 的一组基矢，则 G 的群元素可由 Lie 代数 g 的指数映射得到，即群元素具有形式 $\exp X$，$X \in g$，因而对于 Lie 代数 $g(n)$，相应 Lie 群为 $G(n)$.

为了证明 Lie 群与 Lie 代数之间存在指数映射关系，从群的无穷小元素的表达式(9.2.3)

$$g(\delta\boldsymbol{\alpha}) = g(\mathbf{0}) + \sum_{i=1}^{r} \delta\alpha_i X_i \tag{9.9.4'}$$

寻求有限参数 $\boldsymbol{\alpha}$ 表示的群元素 $g(\boldsymbol{\alpha})$.

令 $\delta\alpha_i = \frac{\alpha_i}{N}$，当 $N\to\infty$ 时，$\delta\alpha_i$ 为无穷小量. 因而(9.2.3)式可写为

$$g(\delta\boldsymbol{\alpha}) = g(\mathbf{0}) + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{r} \alpha_i X_i = g\left(\frac{\boldsymbol{\alpha}}{N}\right)$$

于是

$$\begin{aligned} g(\boldsymbol{\alpha}) &= \lim_{N\to\infty} g\left(\frac{\boldsymbol{\alpha}}{N}\right)^N = \lim_{N\to\infty}\left[E_{n\times n} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{r}\alpha_i X_i\right]^N \\ &= \exp\left[\sum_{i=1}^{r}\alpha_i X_i\right] \end{aligned} \tag{9.9.5}$$

无穷小生成元为 Lie 群 G 所对应的 Lie 代数 g 的基矢，因而 $\sum_{i=1}^{r}\alpha_i X_i \in g$，此即前面已讨论过的(9.2.41)式.

对于线性变换群 X_i 为具有一定性质的非奇异矩阵，因而(9.9.5)式涉及矩阵的指数函数问题. 这些已在(9.2.3)节中做了简要介绍.

由那里的讨论可得到：

(1) 若 M 是反 Hermition 矩阵(即 $M^+ = -M$)，则 $\exp(M)$是酉矩阵；

(2) 若 M 是反对称矩阵($\tilde{M} = -M$)，则 $\exp(M)$是正交矩阵.

因而 $su(n)$ Lie 代数的矩阵为无迹反 Hermition 矩阵，相应 Lie 群为单模酉矩阵. 因为若 $x\in su(n)$，$X^+ = -X$，$\mathrm{tr}X = 0$，则

$$M = \exp X,\quad M^+ = (\exp X)^+ = \exp(-X) = M^{-1}$$

$$\det M = \exp(\mathrm{tr}X) = 1$$

若 Lie 代数 g 为 $o(n, \mathbf{C})$，即矩阵 $X\in o(n, \mathbf{C})$为反对称矩阵，即 $\tilde{X} = -X$，则

$$[\widetilde{\exp X}] = \exp\tilde{X} = \exp(-X) = (\exp X)^{-1}$$

因而 Lie 代数 $o(n, \mathbf{C})$对应于正交群 $O(n, \mathbf{C})$，用 Lie 代数 $so(n, \mathbf{C})$对应于单模正交群 $so(n, \mathbf{C})$，因为

$$\det(\exp X) = \exp(\mathrm{tr}X) = 1$$

(反对称矩阵 $\tilde{X} = -X$，必然 $\mathrm{tr}X = 0$).

对于实 Lie 代数 $Sp(n, \mathbf{C})$的元素 $X\in Sp(n, \mathbf{C})$满足条件可以得到，它的指数映射 $\exp X$，满足条件

$$\begin{aligned} \widetilde{\exp X}\ J\exp X &= \sum_{n,m}^{\infty}\frac{1}{n!m!}(\tilde{X})^n J X^m \\ &= \sum_{n,m}^{\infty}\frac{1}{n!m!}(-X)^n J X^m = J \end{aligned}$$

这就证明了与 Lie 代数 $sp(n, \mathbf{R})$ 对应的 Lie 群为辛群 $Sp(n, \mathbf{R})$. 对于酉辛 Lie 代数 $sp(n)$，元素 X 还满足条件 $\tilde{X} = -X$, 因而指数映射 $\exp X$ 满足条件

$$\exp[\exp X] = \exp(\mathrm{tr}X) = 1$$

$$[\widetilde{\exp X}] = \exp(-X) = [\exp X]^{-1}$$

即 Lie 代数 $Sp(n)$ 对应的 Lie 群为酉辛群 $Sp(n)$.

通过上述讨论，说明了以典型 Lie 代数 A_n 的紧致实型 $su(n+1)$ 的基矢为无穷小算子的 Lie 群为 $SU(n)$ 群，以典型 Lie 代数 B_n 的紧致实型 $o(2n+1, \mathbf{R})$ 为无穷小算子 Lie 群为 $O(n)$ 群或由它的连通部分定义的 $SO(n)$ 群. 以典型 Lie 代数 C_n 的紧致实型 $sp(n)$ 为无穷小算子的 Lie 群为 $Sp(n)$ 群. 以典型 Lie 代数 D_n 的紧致实型 $o(2n, \mathbf{R})$ 为无穷小算子的 Lie 群为 $O(2n)$ 群，这些典型群都是紧致 Lie 群.

9.10 典型 Lie 代数的 Fermi 子实现

9.10.1 Fermi 子的产生和消灭算子及其反交换关系

在物理学中把遵守 Pauli 原理的基本粒子称为 Fermi 子，它们都具有半整数自旋. 如电子、质子、中子等. 在二次量子化表象中定义 Fermi 子的产生算子 $a^+_{m_s,\gamma}\left(\frac{1}{2}\tau\right)$ 和消灭算子 $a_{m_s,\gamma}\left(\frac{1}{2}\tau\right)$，$\frac{1}{2}$ 为 Fermi 子的自旋，$m_s = \pm\frac{1}{2}$ 为自旋在 z 方向上的投影，τ 和 γ 为描述粒子性质的其它量子数. 比如对自由电子用动量 $\boldsymbol{K}$ 标记 τ, γ; 中心力场中的电子用轨道角动量 l 及其 z 分量标记 τ, γ; 分子中电子用点群不可约表示标记 τ 及其分量 γ 标记，晶体中电子 τ 用 (νk^*) (即空间群不可约表示)，γ 为波矢间向量 $\boldsymbol{k}$.

Fermi 子产生和消灭算子满足如下的反交换关系，即

$$\begin{cases} \left[a^+_{m_s,\gamma}\left(\frac{1}{2}\tau\right),\ a^+_{m_s',\gamma'}\left(\frac{1}{2}\tau'\right)\right]_+ = 0 \\ \left[a_{m_s,\gamma}\left(\frac{1}{2}\tau\right),\ a_{m_s',\gamma'}\left(\frac{1}{2}\tau\right)\right]_+ = 0 \\ \left[a^+_{m_s,\gamma}\left(\frac{1}{2}\tau\right),\ a_{m_s',\gamma'}\left(\frac{1}{2}\tau'\right)\right]_+ = \delta_{\tau\tau'}\delta_{m_s m_s'}\delta_{\gamma\gamma'} \end{cases} \tag{9.10.1}$$

在这种反交换关系的基础上，可由 Fermi 子产生和消灭算子构成典型 Lie 代数，称为典型 Lie 代数的 Fermi 子实现.

9.10.2 Fermi 子体系的最大 Lie 代数 $u(2^{2\lambda})$

Fermi 子体系，或者简单说多电子体系，由于存在 $\frac{1}{2}$ 的自旋，它有两个分量 $m_s = \pm\frac{1}{2}$，因而整个体系由偶数 2λ 个粒子构成. 产生和消灭算子简写为

$$a_i^+,\quad a_i,\quad i = 1, 2, \cdots, 2\lambda$$

定义 2λ 个产生或消灭算子之积为

$$\begin{cases} \Pi^+ = a_1^+ a_2^+ \cdots a_{2\lambda}^+ \\ \Pi = a_{2\lambda} a_{2\lambda-1} \cdots a_2 a_1 \\ \Pi^+ | 0\rangle = | \Pi\rangle = | 1, 2, \cdots, 2\lambda\rangle \end{cases} \tag{9.10.2}$$

$|0\rangle$ 为真空态，$|\Pi\rangle$ 为全部填充态.

定义 n 粒子的产生算子和消灭算子为

$$\begin{cases} P_{\varphi(n)}^+ = a_{i_1}^+ a_{i_2}^+ \cdots a_{i_n}^+ \\ P_{\varphi(n)} = a_{i_n} a_{i_{n-1}} \cdots a_{i_2} a_{i_1} \end{cases} \tag{9.10.3}$$

它们是在 2λ 个产生(或消灭)算子中任取 n 个算子所构成，因而对指定的 n，$P_{\varphi(n)}^+$ 有 $\binom{2\lambda}{n}$ 个，同样 $P_{\varphi(n)}$ 也有 $\binom{2\lambda}{n}$ 个. 当粒子数为 0，1，2，…，2λ 时，全部算子 $P_{\varphi(n)}$ 的数目为 $\sum\limits_n \binom{2\lambda}{n} = 2^{2\lambda}$. 算子 $P_{\varphi(n)}^+$ 作用真空态得到

$$P_{\varphi(n)}^+ |0\rangle = |\varphi(n)\rangle = |i_1, i_2, \cdots, i_n\rangle \tag{9.10.4}$$

为 n 个电子的 Slater 状态.

定义算子

$$\hat{Q}_{\varphi\varphi'} = P_{\varphi(n)}^+ \Pi\Pi^+ P_{\varphi'(n')} \tag{9.10.5}$$

它们一共有 $2^{4\lambda}$ 个.

用 $\hat{Q}_{\varphi\varphi'}$ 作用状态(9.10.4)得到

$$\hat{Q}_{\varphi\varphi'} |\varphi(n)\rangle = P_\varphi^+ \Pi\,\Pi^+ P_{\varphi'} P_\varphi^+ |0\rangle$$

容易看到

$$\Pi^+ P_{\varphi'} P_\varphi^+ |0\rangle = \begin{cases} |\Pi\rangle, & 当\ \varphi = \varphi \\ 0, & 当\ \varphi \neq \varphi \end{cases}$$

因而

$$\hat{Q}_{\varphi\varphi'} |\varphi(n)\rangle = \delta_{\varphi'\varphi} |\varphi\rangle \tag{9.10.6}$$

这表明 $\hat{Q}_{\varphi\varphi'}$ 对由 $\{|\varphi(n)\rangle\}$ 构成的函数空间具有投影算符的性质.

另一方面，

$$\hat{Q}_{\psi\psi'} \hat{Q}_{\varphi\varphi'} |\varphi\rangle = \delta_{\varphi\varphi'} \hat{Q}_{\psi\psi'} |\varphi\rangle$$

因为 $|\varphi\rangle$ 是函数空间 $\{|\varphi\rangle\}$ 中的任意态，由此可得到

$$\hat{Q}_{\psi\psi'} \hat{Q}_{\varphi\varphi'} = \delta_{\psi'\varphi} Q_{\psi\varphi'}$$

因而可得到 $\hat{Q}_{\psi\psi'}$ 满足的交换关系

$$[\hat{Q}_{\psi\psi'}, \hat{Q}_{\varphi\varphi'}] = \delta_{\psi'\varphi} \hat{Q}_{\psi\varphi'} - \delta_{\psi\varphi'} \hat{Q}_{\varphi\psi'} \tag{9.10.7}$$

这表明 $2^{4\lambda}$ 个算子 $\hat{Q}_{\varphi\varphi}$ 构成一个 Lie 代数，其结构常数为

$$C_{\psi\psi', \varphi\varphi'}^{\alpha\alpha'} = \delta_{\psi'\varphi} \delta_{\varphi\alpha} \delta_{\varphi'\alpha'} - \delta_{\psi\varphi'} \delta_{\varphi\alpha} \delta_{\varphi\alpha'} \tag{9.10.8}$$

令

$$\hat{Q}_{\psi\psi} = \hat{H}_{\psi}, \quad 共\ 2^{2\lambda}个 \tag{9.10.9}$$

则

$$\begin{cases} [\hat{H}_{\psi}, \hat{H}_{\psi'}] = 0 \\ [\hat{H}_{\psi}, \hat{Q}_{\varphi\varphi'}] = (\delta_{\psi\varphi} - \delta_{\psi\varphi'})\hat{Q}_{\varphi\varphi'} \\ [\hat{Q}_{\psi\psi'}, \hat{Q}_{\varphi\varphi'}] = \delta_{\psi'\varphi}\hat{Q}_{\psi\varphi'} - \delta_{\psi\varphi'}\hat{Q}_{\varphi\psi'} \end{cases} \tag{9.10.10}$$

这说明$\{H_{\psi}, \hat{Q}_{\varphi\varphi'}, \varphi \neq \varphi'\}$构成 C-W 基，它们为典型 Lie 代数 $u(2^{2\lambda})$. 这是由 Fermi 子产生和消灭算子所构成的最大的 Lie 代数. 以这个 Lie 代数为无穷小算子的 Lie 群为$U(2^{2\lambda})$群.

在上述讨论中，实际上已经说明 $2^{2\lambda}$维的函数空间$\{|\varphi\rangle\}$是它的不可约表示空间.

9.10.3 $u(2^{2\lambda})$的子代数 $o(4\lambda+1)$和 $o(4\lambda)$

1. Lie 代数 $o(4\lambda+1)$

取算子集合

$$\left\{a_i^+, a_i, \frac{1}{2}[a_i^+, a_j], a_i^+a_j^+, a_ia_j, \quad i, j = 1, 2, \cdots, 2\lambda\right\} \tag{9.10.11}$$

共$2\lambda(2\lambda+1)$个算子，它们在交换关系之下构成一个封闭的集合，因而构成一个子 Lie 代数.

令

$$H_i = \frac{1}{2}[a_i^+, a_i] = a_i^+a_i - \frac{1}{2}, \quad i = 1, 2, \cdots, 2\lambda$$

于是算子集合

$$\left\{H_i, a_i^+, a_i, \frac{1}{2}[a_i^+, a_j], a_i^+a_j^+, a_ia_j, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, 2, \cdots, 2\lambda\right\}$$

构成这个 Lie 代数的 C-W 基，即

$$\begin{cases} [H_i, H_j] = 0 \\ [H_i, a_j^+] = \delta_{ij}a_j^+ \\ [H_i, a_j] = \delta_{ij}a_j \\ \left[H_i, \frac{1}{2}[a_k^+, a_l]\right] = (\delta_{ik} - \delta_{il})\frac{1}{2}[a_k^+, a_l] \\ [H_i, a_k^+a_l^+] = (\delta_{ik} + \delta_{il})a_k^+a_l^+ \\ [H_i, a_ka_l] = -(\delta_{ik} + \delta_{il})a_ka_l \end{cases} \tag{9.10.12}$$

它的根为$\pm e_i$, $\pm e_i \pm e_j$, $\pm e_i \mp e_j$, 为典型 Lie 代数 $B_{2\lambda}$，也就是 Lie 代数 $so(4\lambda+1)$相应的 Lie 群为 $SO(4\lambda+1)$群.

用这些算子作用于函数空间$\{|\varphi\rangle\}$可看到

$$H_i|\varphi\rangle = \begin{cases} \frac{1}{2}|\varphi\rangle, & 若\ \varphi \ni i \\ -\frac{1}{2}|\varphi\rangle, & 若 \not\ni i \end{cases}$$

因而$\{|\varphi\rangle\}$也是 Lie 代数 $so(4\lambda+1)$的不可约表示空间.

由于在 Lie 代数 $so(4\lambda+1)$中包括 a_i^+ 和 a_i，它们满足反交换关系(9.10.1)，因而 Lie 代数 $so(4\lambda+1)$为超 Lie 代数，相应的 Lie 群 $SO(4\lambda+1)$是超 Lie 群.

2. Lie 代数 $so(4\lambda)$

取 Lie 代数 $so(4\lambda+1)$算子集合(9.10.12)的子集

$$\{[a_i^+,\ a_j],\ a_i^+a_j,\ a_ia_j,\quad i\neq j,\quad i,j=1,2,\cdots,2\lambda\}$$

共 $2\lambda(2\lambda-1)$算子，它们构成 Lie 代数 $D_{2\lambda}$，亦即 $so(4\lambda)$，即

$$\begin{cases}[H_i,\ a_j^+a_l^+] = (\delta_{ij}+\delta_{jl})a_j^+a_l^+\\ [H_i,\ a_ja_l] = -(\delta_{ij}+\delta_{il})a_ja_l\\ [H_i,\ [a_j^+,\ a_l]] = (\delta_{ij}-\delta_{il})[a_j^+,\ a_l]\end{cases} \tag{9.10.13}$$

根为 $\pm e_i\pm e_j$，$\pm e_i\pm e_j$.

与 $so(4\lambda)$相应的 Lie 群为 $SO(4\lambda)$群.

利用 $so(4\lambda)$的算子作用于空间$\{|\varphi\rangle\}$可把$\{|\varphi\rangle\}$分为两个子空间$\{|\varphi\rangle$，偶数粒子$\}$和$\{|\varphi\rangle$，奇数粒子$\}$. 每个子空间是 $SO(4\lambda)$群的不可约表示空间.

由这两节讨论可看到由 2λ 个 Fermi 子的产生和消灭算子可构成一个 Lie 群链，即

$$U(2^{2\lambda})\supset SO(4\lambda+1)\supset SO(4\lambda)$$

而由 2λ 个 Fermi 子状态构成的函数空间对 $U(2^{2\lambda})$群和 $SO(4\lambda+1)$群都是不可约的表示空间，而对 $SO(4\lambda)$群分解为两个不可约表示空间的直和，即

$$\begin{array}{ccccc} U(2^{2\lambda}) & \supset & SO(4\lambda+1) & \supset & SO(4\lambda) \\ [1,0,\cdots,0] & \to & \left[\frac{1}{2},\frac{1}{2},\cdots,\frac{1}{2}\right] & \to & \begin{cases}\left[\frac{1}{2},\cdots,\frac{1}{2}\right] & (\text{偶数粒子空间})\\ \left[\frac{1}{2},\cdots,-\frac{1}{2}\right] & (\text{奇数粒子空间})\end{cases}\end{array}$$

9.10.4　$SO(4\lambda)$群的子群 $SU^Q(2)\otimes Sp(2\lambda)$及其群链

1. 准自旋与 $su(2)$代数

定义算子 $\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau\right)_{m_s\gamma}$ 为

$$\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau\right)_{m_s\gamma}=[-1]^{\frac{1}{2}-m_s}(-1)^{\tau-\gamma}a\left(\frac{1}{2}\tau\right)_{\bar{m}_s\bar{\gamma}} \tag{9.10.14}$$

它与 $a^+\left(\frac{1}{2}\tau\right)_{m_s\gamma}$ 一样都是点群不可约表示 τ 的不可约张量算子. 对于原子轨道 $\tau=l$ 为 $SO(3)$群不可约表示，于是(9.10.14)式为

$$\tilde{a}\left(\frac{1}{2}l\right)_{m_sm_l}=(-1)^{\frac{1}{2}-m_s}(-1)^{l-m_l}a\left(\frac{1}{2}l\right)_{\bar{m}_s\bar{m}_l}$$

现在考虑混合组态$\{\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_k\}$，如过渡金属原子中电子为混合组态$\{l=0,1,2\}$或$(s,p,d)$，具有 O 群对称性的分子混合组态$\{a_1,t_1\quad e,t_2\}$，它们为 O 群不可约表示. 此时混合组态维数 λ 为 $\lambda=\{\lambda(\tau_1),\lambda(\tau_2),\cdots,\lambda(\tau_k)\}$，$\lambda(\tau_i)$为不可约表示 τ_i 的维数，对原子轨道 $\lambda(l)=2l+1$.

定义如下算子：

$$\begin{cases} Q_+ = \frac{1}{2}\sum_{\tau_i m_s \gamma}(-1)^{\frac{1}{2}-m_s}(-1)^{\tau_i-\gamma_i}a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{\bar{m}_s\bar{\gamma}} \\ Q_- = \frac{1}{2}\sum_{\tau_i m_s \gamma_i}(-1)^{\frac{1}{2}-m_s}(-1)^{\tau_i-\gamma_i}\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{\bar{m}_s\bar{\gamma}_i} \\ \quad = \frac{1}{2}\sum_{\tau_i m_s \gamma_i}(-1)^{\frac{1}{2}-m_s}(-1)^{\tau_i-\gamma_i}a\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}a\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{\bar{m}_s\bar{\gamma}_i} \\ Q_0 = -\frac{1}{4}\sum_{\tau_i m_s \gamma_i}(-1)^{\frac{1}{2}-m_s}(-1)^{\tau_i-\gamma_i} \\ \quad \cdot\left[a\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)^+_{m_s\gamma_i}\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{\bar{m}_s\bar{\gamma}_i} - a\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\tilde{a}^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{\bar{m}_s\bar{\gamma}_i}\right] \\ \quad = \frac{1}{2}\sum_{\tau_i m_s \gamma_i}\left[a\left(\frac{1}{2}\tau\right)^+_{m_s\gamma_i}a\left(\frac{1}{2}\tau\right)_{m_s\gamma_i} - \frac{1}{2}\right] \end{cases} \tag{9.10.15}$$

由产生和消灭算子的 Fermi 反交换关系(9.10.1)容易证明(9.10.13)式定义的三个算子满足如下的交换关系，即

$$[Q_+, Q_-] = 2Q_0$$

$$[Q_0, Q_\pm] = \pm Q_\pm \tag{9.10.16}$$

这说明(Q_0，Q_+，Q_-)生成一个 Lie 代数 $su(2)$，相应 Lie 群为 $SU^Q(2)$，称为准自旋群(Quasi-Spin group)．而且

$$\begin{cases} \left[Q_+, a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\right] = 0 \\ \left[Q_0, a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\right] = \frac{1}{2}a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i} \\ \left[Q_-, a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\right] = \tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i} \\ \left[Q_+, \tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\right] = a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i} \\ \left[Q_0, \tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\right] = -\frac{1}{2}\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i} \\ \left[Q_-, \tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\right] = 0 \end{cases} \tag{9.10.17}$$

这说明 $\left\{a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}, \tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\right\}$ 为准自旋群 $SU^Q(2)$ 的 $\frac{1}{2}$ 秩的不可约张量子，$a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}$ 权为 $\frac{1}{2}$，$\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}$ 的权为 $-\frac{1}{2}$(关于权的定义在下章中将讨论).

由于产生算子 $a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}$ 与消灭算子 $\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}$ 分别为自旋空间 $SU(2)$ 群和轨道空间群 G 的不可约张量算子，而现在又证明了它们还是准自旋群 $SU^Q(2)$ 的不可约张量

算子. 因而，可把它们视为准自旋、自旋和轨道空间直积群

$$SU^Q(2)\otimes SU(s)\otimes G$$

的三张量算子

$$a^{\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \tau_i}_{q\ m_s\ \gamma_i}=\begin{cases}a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}, & q=\frac{1}{2}\\ \tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}, & q=-\frac{1}{2}\end{cases} \tag{9.10.18}$$

上指标$\frac{1}{2}$为 $SU^Q(2)$群的不可约表示，q 为它的分量，第二个$\frac{1}{2}$为自旋群 $SU(2)$的不可约表示，m_s 为它的分量，τ_i 为轨道空间 G 群的不可约表示(对原子轨道 $G=SO(3)$)，γ_i 为它的分量.

因而可定义这三个群的耦合张量算子.

$$W^{Q\ S\ \Gamma}_{q\ M_s\ \gamma}(\tau_i\tau_j)=\sum_{q_1q_2}\sum_{m_{s1}m_{s2}}\sum_{\tau_i\tau_j}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2},q_1q_2\mid Qq\right)\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2},m_{s_1}m_{s_2}\mid SM\right)$$
$$\cdot(\tau_i\gamma_i,\ \tau_j\gamma_j\mid \Gamma\gamma)a^{\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \tau_i}_{q_1\ m_{s_1}\ \gamma_i}a^{\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \tau_j}_{q_2\ m_{s_2}\ \gamma_j} \tag{9.10.19}$$

$\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2},q_1q_2\mid Qq\right)$，$\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2},m_{s_1}m_{s_2}\mid SM_S\right)$，$(\tau_i\gamma_i,\ \tau_j\gamma_j\mid\Gamma\gamma)$分别为三个群的 C-G 系数.

利用 $SU(2)$群的 C-G 系数.

$$\left(\frac{1}{2}m_{s_1},\ \frac{1}{2}m_{s_2}\mid 00\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}(-1)^{\frac{1}{2}-m_{s_1}}\delta_{m_{s_1}}\delta_{\bar{m}_{s_2}}$$

和群 G 恒等表示 A 的 C-G 系数.

$$(\tau_i\gamma_i,\ \tau_j\gamma_j\mid A\ a)=\delta_{\tau_i\tau_j}\delta_{\gamma_i\bar{\gamma}_j}\frac{1}{\sqrt{\lambda(\tau_i)}}(-1)^{\tau_i-\gamma_i}$$

可得到(9.10.14)式定义的准自旋算子为

$$Q_\pm=\pm\sqrt{\frac{1}{2}}\sum_{\tau_i}\sqrt{\lambda(\tau_i)}W^{1\ \ 0\ \ A}_{\pm1\ 1\ a}(\tau_i\tau_i)$$
$$Q_0=-\frac{1}{2}\sum_{\tau_i}\sqrt{\lambda(\tau_i)}W^{1\ 0\ A}_{0\ 0\ a}(\tau_i\tau_i) \tag{9.10.20}$$

2. Lie 代数 $sp(2\lambda)$与 $SP(2\lambda)$群

定义算子

$$W^{0\ \ S\ \ \Gamma}_{0\ M_S\ \gamma}(\tau_i\tau_j)$$
$$=\sum_{q_1q_2}\sum_{m_{s_1}m_{s_2}}\sum_{\tau_i\tau_j}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2},q_1q_2\,\middle|\,00\right)\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2},m_{s_1}m_{s_2}\,\middle|\,SM_S\right)$$
$$\cdot(\tau_i\gamma_i,\ \tau_j\gamma_j\mid\Gamma\gamma)a^{\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \tau_i}_{q_1\ m_{s_1}\ \gamma_i}a^{\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \tau_j}_{q_2\ m_{s_2}\ \gamma_j}$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{m_{s_1}m_{s_2}\tau_i\tau_j}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2},m_{s_1}m_{s_2}\,\middle|\,SM_S\right)(\tau_i\gamma_i,\ \tau_j\gamma_j\mid\Gamma\gamma)$$
$$\cdot\left[a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_{s_1}\gamma_i}\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_j\right)_{m_{s_2}\gamma_j}-\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_{s_1}\gamma_i}a^+\left(\frac{1}{2}\tau_j\right)_{m_{s_2}\gamma_j}\right] \tag{9.10.21}$$

由反交换关系(9. 10. 1)可证明

$$[W^{1\ 0\ A_1}_{\alpha\ 0\ a}(\tau_i\tau_i),\ W^{0\ S\ \Gamma}_{0\ M_s\ \rho}(\tau_i\tau_j)]=0 \tag{9. 10. 22}$$

这表明算子集合

$\{W^{0\ S\ \Gamma}_{0\ M_s\ \gamma}(\tau_i\tau_j)\mid s=1,\ M_s=1,\ 0,\ -1;\ s=0,\ M_s=0;\ \tau_i,\ e_j=\tau_1,\ \tau_2,\ \cdots,\ \tau_k,\ \Gamma\in\tau_i\otimes\tau_j\}$ 与 $W^{1\ 0\ A_1}_{\alpha\ 0\ a}(\tau_i\tau_i)$ 是可交换的，它自身构成一个 Lie 代数 $Sp(2\lambda)$. 下面就证明它.

为了得到 Lie 代数 $Sp(2\lambda)$，把算子 $W^{0\ S\ \Gamma}_{0\ M_s\ \rho}(\tau_i\tau_j)$ 变换为

$$\begin{aligned}
&E(\tau_i\tau_j)_{m_s\gamma_i,\ m_s'\gamma_j}\\
&=\sqrt{2}(-1)^{\frac{1}{2}-m_s'}[-1]^{\tau_j-\gamma_j}\sum_{SM_s}\sum_{\Gamma\rho}\left(\frac{1}{2}m_s,\ \frac{1}{2}m_s'\,\middle|\,SM_s\right)\\
&\cdot(\tau_i\gamma_i,\ \tau_j\gamma_j\mid\Gamma\rho)W^{0\ S\ \Gamma}_{0\ M_s\ \rho}(\tau_i\tau_j)\\
&=a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}a\left(\frac{1}{2}\tau_j\right)_{\bar{m}_s\bar{\gamma}_j}-(-1)^{m_s+m_s'}[-1]^{\tau_i-\gamma_i+\tau_j-\gamma_j}a^+\left(\frac{1}{2}\tau_j\right)_{m_s'\gamma_j}a\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{\bar{m}_s\bar{\gamma}_i}\\
&\quad+2\delta_{\tau_i\tau_j}\delta_{m_s\bar{m}_s'}\delta_{\gamma_i\bar{\gamma}_j}
\end{aligned} \tag{9. 10. 23}$$

显然对交换 $m_l\gamma_i$ 与 $m_l'\gamma_j$，它具有对称性，即

$$E(\tau_i\tau_j)_{m_s\gamma_i,\ m_s'\gamma_j}=(-1)^{1+m_s+m_s'}[-1]^{\tau_i-\gamma_i+\tau_j-\gamma_j}E(\tau_j\tau_i)_{m_s'\gamma_j,\ m_s\gamma_i} \tag{9. 10. 23'}$$

而且

$$E(\tau_i\tau_i)_{m_s\gamma_i,\ m_s\gamma_i}=2a^+\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}a\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{\bar{m}_s\bar{\gamma}_i} \tag{9. 10. 24}$$

因而独立算子数为 $\frac{2\lambda(2\lambda+1)}{2}+2\lambda=2\lambda^2+\lambda$ 个.

为了符号简单，用 α_i 代表 $\tau_i\gamma_i m_s$，则上述算子可写为 $E_{\alpha_i,\ \alpha_j}$，并令 $E_{\alpha_i,\ \alpha_i}=H_{\alpha_i}$，于是可得到它们的交换关系为

$$\begin{cases}
[H_{\alpha_i},\ H_{\alpha_j}]=0\\
[H_{\alpha_i},\ E_{\alpha_j\alpha_k}]=(\delta_{\alpha_i\alpha_k}-\delta_{\alpha_i\alpha_j}+\delta_{\alpha_i\bar{\alpha}_j}-\delta_{\alpha_i\bar{\alpha}_k}E_{\alpha_j\alpha_k})\\
[E_{\alpha_i,\ \alpha_j},\ E_{\alpha_j\alpha_i}]=-H_{\alpha_i}+H_{\alpha_j}
\end{cases} \tag{9. 10. 25}$$

这说明 $2\lambda^2+\lambda$ 个算子 $\{H_{\alpha_i},\ E_{\alpha_j,\ \alpha_k}\}$ 为典型 Lie 代数 C_λ，它的实型为 Lie 代数 $sp(2\lambda)$. 因而，生成 Lie 群 $sp(2\lambda)$，得到 Lie 群链.

$$U(2^{2\lambda})\supset SO(4\lambda+1)\supset SO(4\lambda)\supset SU^Q(2)\otimes Sp(2\lambda)$$

3. $Sp(2\lambda)$ 的子群

Lie 代数 $Sp(2\lambda)$ 包括两个子代数，它们为

$$\{\hat{S}^1_{m_s}=\sum_{\tau_i}W^{0\ 1\ A}_{0\ M_s\ a}(\tau_i\tau_i)\},\ \{W^{0\ 0\ \Gamma}_{0\ 0\ \rho}(\tau_i\tau_j)\}$$

算子

$$\begin{aligned}
\hat{S}^1_{m_s}&=\sum_{\tau_i}W^{0\ 1\ A}_{0\ M_s\ a}(\tau_i\tau_i)\\
&=\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{m_sm_s'}\sum_{\gamma_i}\left(\frac{1}{2}m_s,\ \frac{1}{2}m_s'\mid M_S\right)\frac{[-1]^{\tau_i-\gamma_i}}{\sqrt{\lambda(\tau_i)}}
\end{aligned}$$

$$\cdot\left[a^{+}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\tilde{A}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s'\bar{\gamma}_i}+\tilde{A}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}a^{+}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s'\bar{\gamma}_i}\right] \tag{9.10.26}$$

容易证明它们构成 Lie 代数 $su(2)$. 相应 Lie 群为 $SU(2)$ 描述 Fermi 子自旋，而且

$$[W^{0}_{0}\,{}^{1}_{M_s}\,{}^{A}_{a}(\tau_i\tau_i),\ W^{0}_{0}\,{}^{0}_{0}\,{}^{\Gamma}_{\rho}(\tau_i\tau_j)]=0$$

算子

$$\begin{aligned}
&W^{0}_{0}\,{}^{0}_{0}\,{}^{\Gamma}_{\rho}(\tau_i\tau_j)\\
&=\sum_{\gamma_i\gamma_j}(\tau_i\gamma_i,\ \tau_j\gamma_j\mid \Gamma\rho)\sum_{qm_s}\frac{1}{2}(-1)^{\frac{1}{2}-q}(-1)^{\frac{1}{2}-m_s}a^{\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \tau_i}_{q\ m_s\ \gamma_i}a^{\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \tau_j}_{\bar{q}\ \bar{m}_s\ \gamma_j}\\
&=\frac{1}{2}\sum_{\tau_i\gamma_j}(\tau_i\gamma_i,\ \tau_j\gamma_j\mid \Gamma\rho)\\
&\quad\cdot\sum_{m_s}(-1)^{\frac{1}{2}-m_s}\left[a^{+}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_j\right)_{\bar{m}_s\gamma_j}-\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{m_s\gamma_i}a^{+}\left(\frac{1}{2}\tau_j\right)_{\bar{m}_s\gamma_j}\right]\\
&=\frac{1}{2}\sum_{\gamma_i\gamma_j}(\tau_i\gamma_i,\ \tau_j\gamma_j\mid \Gamma\rho)\left[a^{+}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{\frac{1}{2}\gamma_i}\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_j\right)_{-\frac{1}{2}\gamma_j}\right.\\
&\quad-a^{+}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{-\frac{1}{2}\gamma_i}\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_j\right)_{-\frac{1}{2}\gamma_j}-\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{\frac{1}{2}\gamma_i}a^{+}\left(\frac{1}{2}\tau_j\right)_{-\frac{1}{2}\gamma_j}\\
&\quad\left.-\tilde{a}\left(\frac{1}{2}\tau_i\right)_{-\frac{1}{2}\gamma_i}a^{+}\left(\frac{1}{2}\tau_j\right)_{\frac{1}{2}\gamma_j}\right]
\end{aligned} \tag{9.10.28}$$

它具有对称性

$$W^{0}_{0}\,{}^{0}_{0}\,{}^{\Gamma}_{\rho}(\tau_i\tau_j)=(-1)^{1+\Gamma}W^{0}_{0}\,{}^{0}_{0}\,{}^{\Gamma}_{\rho}(\tau_j\tau_i)-2\sqrt{\lambda(\tau_i)}\delta_{\tau_i\tau_j}\delta_{\Gamma A} \tag{9.10.29}$$

即当 $\tau_i=\tau_j$ 时，

$$W^{0}_{0}\,{}^{0}_{0}\,{}^{A}_{a}(\tau_i\tau_j)=-\sqrt{\lambda(\tau_i)}$$

当 $(-1)^{\Gamma}=-1$ 时，

$$W^{0}_{0}\,{}^{0}_{0}\,{}^{\Gamma}_{\rho}(\tau_i\tau_i)\neq 0$$

因而独立算子为 λ^2 个，它们构成 Lie 代数 $u(\lambda)$，相应 Lie 群为 $u(\lambda)$.

比如对原子轨道 $\tau=l$，于是

$$\begin{aligned}
W^{0}_{0}\,{}^{0}_{0}\,{}^{L}_{M_L}(ll)&=\sum_{m_lm_l'}(ll',\ m_lm_l'\mid LM_L)\\
&\quad\cdot\sum_{qm_s}\frac{1}{2}(-1)^{\frac{1}{2}-m_s}(-1)^{\frac{1}{2}-q}a^{\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ l}_{q\ m_s\ m_l}a^{\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ l}_{\bar{q}\ \bar{m}_s\ m_l'}
\end{aligned} \tag{9.10.30}$$

交换关系为

$$\begin{aligned}
&[W^{0}_{0}\,{}^{0}_{0}\,{}^{L}_{M_L}(ll),\ W^{0}_{0}\,{}^{0}_{0}\,{}^{L'}_{M_{L'}}(ll)]\\
&=\sum_{L''}\sum_{M_{L''}}[(2L+1)(2L'+1)(2L''+1)]^{\frac{1}{2}}\\
&\quad\cdot(-1)^{L''-M_{L''}}\begin{Bmatrix}L & L' & L''\\ l & l & l\end{Bmatrix}\begin{pmatrix}L & L' & L''\\ M_L & M_{L'} & \bar{M}_{L''}\end{pmatrix}\\
&\quad\cdot((-1)^{L'}+(-1)^{L''})(1-(-1)^{L_1})W^{0}_{0}\,{}^{0}_{0}\,{}^{L''}_{M_{L''}}(ll)
\end{aligned} \tag{9.10.31}$$

它们构成一 Lie 代数，维数为

$$n = \sum_{L=0}^{2l}(2L+1) = (2l+1)^2$$

因而得到群链

$$U(2^{2\lambda}) \supset SO(4\lambda+1) \supset SO(4\lambda) \supset SU^Q(2) \otimes [Sp(2\lambda) \supset SU(2) \otimes U(\lambda)] \qquad (9.10.32)$$

对 $l=3$ 的原子轨道，群链(9.10.32)具体化为

$$U(2^{14}) \supset SO(29) \supset SO(27) \supset SU^Q(2) \otimes [Sp(14) \supset SU(2) \times U(7)]$$

算子 $W^{0\ 0\ L}_{0\ 0\ M_L}(3,3)$ 中 $L=1,3,5$ 的 21 个算子由交换关系(9.10.31)可得到它们构成一个封闭的子集，即

$$\{W^{0\ 0\ L}_{0\ 0\ M_L}(3,3),\quad L=1,3,5\} \qquad (9.10.33)$$

这个子集为 Lie 代数 $SO(7)$，由于 $9-j$ 符号

$$\begin{Bmatrix} 5 & 5 & 3 \\ 3 & 3 & 3 \end{Bmatrix} = 0$$

因而 $SO(7)$ 的子集 $\{W^{0\ 0\ L}_{0\ 0\ M_L}(3,3)\quad L=1,5\}$ 也是封闭的，它们共 14 算子，为 Lie 代数 G_2. 而 $\{W^{0\ 0\ 1}_{0\ 0\ M_S}(3,3)\}$ 也是一个封闭的子集，它们为 Lie 代数 $so(3)$. 因而得到群链

$$U(7) \supset SO(7) \supset G_2 \supset SO(3) \qquad (9.10.34)$$

9.10.5 $SO(4\lambda)$ 群的子群 $U(2\lambda)$ 及其群链

通过类似讨论可得到

$$\{W^{0\ S\ \Gamma}_{0\ M_S\ \rho}(\tau_i,\tau_j),\ (2\lambda)\text{个算子}\}$$

构成一个封闭的集合，它们为 Lie 代数 $u(2\lambda)$，相应 Lie 群为 $u(2\lambda)$. 重复上节讨论可得到群链

$$U(2^{2\lambda}) \supset SO(4\lambda+1) \supset SO(4\lambda) \supset U(2\lambda) \supset SU(2) \otimes [U(\lambda) \supset SO(\lambda) \supset SO(3)] \qquad (9.10.35)$$

同时由群 $U(\lambda)$ 也可得群链

$$U(\lambda) \supset U(\lambda-1) \supset \cdots \supset U(1) \qquad (9.10.36)$$

这些群链对研究原子和分子问题是很有用的. 如果对核子，可引入同位旋(Isospin)群 $SU^I(2)$，这些理论便可应用于核理论了.

本节内容基础部分引自 Wybourne. B. G.,"Classical Groups for Physicists"，其它部分参阅孙家钟，李伯符，李泽生著《量子化学中的不可约张量方法》.

第十章　Lie 群与 Lie 代数的表示理论

在本章中一般地讨论半单紧致 Lie 代数和 Lie 群的表示理论，并简单讨论直积表示及其分解，最后讨论 Cassimir 算子的本征值问题.

10.1　Lie 群与 Lie 代数的表示

10.1.1　表示的一般概念

第一章中关于有限群的表示的定义对连续群(包括 Lie 群)仍然适用. 如果 Lie 群 G 与 n 维线性复空间 $\mathbf{C}^n$ 中的线性变换群同态，亦即 Lie 群 G 与复空间 $\mathbf{C}^n$ 的 $n\times n$ 非奇矩阵群同态，则称 $n\times n$ 的非奇异矩阵群为 Lie 群 G 的表示. 若 Lie 群每一个元素 g 都对应一个 $n\times n$ 矩阵 $D(g)$，若 $g_1, g_2\in G$，它们分别与矩阵 $D(g_1)$ 和 $D(g_2)$ 相对应，同态要求 g_1g_2 对应于 $D(g_1g_2)$. 由于是 Lie 群还要求

$$(g_\lambda, g_\sigma) = C^\tau_{\lambda\sigma}g_\tau \tag{10.1.1}$$

$$(D(g_\lambda), D(g_\sigma)) = C^\tau_{\lambda\sigma}D(g_\tau) \tag{10.1.2}$$

$C^\tau_{\lambda\sigma}$ 为 Lie 群 G 的结构常数，g_λ，g_σ，g_σ 为 Lie 群 G 的无穷小生成元.

这种关于 Lie 群的表示的定义，也适用于相应的 Lie 代数，即 Lie 代数的表示是 n 维空间上的线性变换 Lie 代数.

Lie 群的表示同样可分为忠实表示和非忠实表示. 如果 Lie 群与它的表示矩阵群一一对应，或者说同构，则为忠实表示，否则为非忠实表示.

如果 Lie 群或 Lie 代数的两个表示 $D(g)$，$(g\in G)$ 和 $R(g)$ $(g\in G)$，存在一个矩阵 $\hat{P}$ 使

$$\hat{P}D(g)\hat{P}^{-1} = R(g), \quad 对全部\ g\in G \tag{10.1.3}$$

则称两个表示 $D(g)$ 和 $R(g)$ 为等价表示.

如果一个表示，除了零元素外，在表示空间 $\mathbf{R}^n$ 中不存在其它不变子空间，则称为不可约表示. 如果存在一个 n_1 维的不变子空间 $\mathbf{R}^{n_1}\subset\mathbf{R}^n$，则称是可约表示，可约表示的表示矩阵在适当选择基矢后可变换为

$$\begin{pmatrix} D_{n_1\times n_1}(g) & B_{n_1\times n_2}(g) \\ O & D'_{n_2\times n}(g) \end{pmatrix}, \quad n_1+n_2=n$$

如果可约表示通过基矢选择可变换为

$$D(g) = \begin{pmatrix} D_{n_1\times n_1}(g) & O \\ O & D'_{n_2\times n_2}(g) \end{pmatrix} = D_{n_1\times n_1}(g)\oplus D_{n_2\times n_1}(g) \tag{10.1.4}$$

则称为是完全可约的表示.

Lie 群的表示也可分为酉表示和非酉表示，所谓酉表示就是表示矩阵为酉矩阵.

由于 Lie 群是连续群，因而它的表示比有限群更为复杂. 既有有限维的表示，又有无限维的表示；有酉表示也有非酉表示；有完全可约表示也有非完全可约表示.

关于连通单纯 Lie 群及其 Lie 代数的表示有以下两个重要定理.

定理 10.1.1 连通紧致单纯 Lie 群的不可约酉表示都是完全可约的有限维表示，而其它表示都是无限维的不完全可约的非酉表示.

定理 10.1.2 连通非紧致单纯 Lie 群的不可约酉表示除了平庸的 1 维表示外，都是无限维表示.

这些定理的证明有兴趣读者可参阅原始文献 G. L. Mahta"Clssification of Irreducible Unitary Representations of Compact Simple Lie Groups Ⅰ"，以及Ⅱ；J. Math. Phys. 1，1824，1883(1966).

由定理 10.1.1 可看到连通紧致单纯 Lie 群的无限维表示都是非酉表示，也是不完全可约表示. 由定理 10.1.2 可看出连通非紧致单纯 Lie 群的不可约酉表示除 1 维表示外，都是无限维的，而有限维表示除 1 维表示外都是非酉表示.

在本章中只讨论单纯紧致 Lie 群的有限维的完全可约的酉表示.

10.1.2 群上不变积分与紧致 Lie 群不可约表示的广义正交定理

在有限群的情况下，定义在群 G 上的函数 $f(g)$，$g \in G$，对群元素 g 求和具有不变性：

$$\sum_{g \in G} f(g) = \sum_{g \in G} f(sg) = \sum_{g \in G} f(gs), \quad s \in G \tag{10.1.5}$$

这个等式由有限群的重排定理很容易得到证明.

当群 G 为连续群时，对群函数的求和应变为积分，等同于上述不变量应为群的不变积分，即

$$\int_G f(g)\,\mathrm{d}\tau_g = \int_G f(sg)\,\mathrm{d}\tau_{sg} = \int_G f(gs)\,\mathrm{d}\tau_{gs} \tag{10.1.6}$$

$\mathrm{d}\tau_g$ 为邻域 $O(g)$ 中群的体积元，$\mathrm{d}\tau_{sg}$和 $\mathrm{d}\tau_{gs}$分别为邻域 $O(sg)$ 和 $O(gs)$ 中的体积元，或者称为邻域 $O(g)$ 或 $O(sg)$，$O(gs)$ 中的测度(measure).

对于连续群，群上不变积分(10.1.6)式在什么条件下才成立，是一个需要研究的问题.

对于 Lie 群，群元素 g 可由参数空间 R^r 中的向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 描述，因而 $\mathrm{d}\tau_g$ 可写为

$$\mathrm{d}\tau_g = \rho(\boldsymbol{\alpha})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}$$

$\rho(\boldsymbol{\alpha})$为 $\boldsymbol{\alpha}$ 处群元素的密度. 而 $sg = h$，s 和 h 的相应参数向量为 $\boldsymbol{\beta}$ 和 $\boldsymbol{\gamma}$，而合成函数为

$$h(\boldsymbol{\gamma}) = s(\boldsymbol{\beta})g(\boldsymbol{\alpha}), \quad \boldsymbol{\gamma} = f(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha}).$$

于是

$$\mathrm{d}\tau_{sg} = \rho(\boldsymbol{\gamma})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\gamma}$$

由一般微分法则

$$\mathrm{d}\gamma_k = \left.\frac{\partial f_k(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_i}\right|_{\alpha=\alpha_0} \mathrm{d}\alpha_i$$

由此得到

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\gamma} = J(\boldsymbol{\beta})\,\mathrm{d}(\boldsymbol{\alpha}_0)$$

其中 Jacobi 行列式为

$$J(\boldsymbol{\beta}) = \begin{vmatrix} \left.\dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{\partial \alpha_1}\right|_{\alpha=\alpha_0} & \cdots & \left.\dfrac{\partial f_r(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{\partial \alpha_1}\right|_{\alpha=\alpha_0} \\ \vdots & & \vdots \\ \left.\dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{\partial \alpha_r}\right|_{\alpha=\alpha_0} & \cdots & \left.\dfrac{\partial f_r(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{\partial \alpha_r}\right|_{\alpha=0} \end{vmatrix} \tag{10.1.7}$$

因而密度函数 $\rho(\boldsymbol{\gamma})$ 为

$$\rho(\boldsymbol{\gamma}) = \rho(\boldsymbol{\alpha}_0)/J(\boldsymbol{\beta}) \tag{10.1.8}$$

于是

$$\mathrm{d}\tau_{sg} = \rho(\boldsymbol{\gamma})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\gamma} = \mathrm{d}\tau_g = \rho(\boldsymbol{\alpha}_0)\,\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}_0 \tag{10.1.9}$$

这表明只要给定 $\boldsymbol{\alpha}_0$ 处的密度函数 $\rho(\boldsymbol{\alpha}_0)$，就可由(10.1.8)式通过 Jacebi 行列式得到群空间的密度函数 $\rho(\boldsymbol{\gamma})$，从而得到群上的不变积分.

$$\int_G f(g)\,\mathrm{d}\tau_g = \int_G f(sg)\,\mathrm{d}\tau_{sg} \tag{10.1.10}$$

称为左不变积分，$J(\boldsymbol{\beta})$ 记为 $J_L(\boldsymbol{\beta})$，密度函数 $\rho(\boldsymbol{\gamma})$ 也记为 $\rho_L(\boldsymbol{\gamma})$.

同样可讨论右不变积分，即

$$\mathrm{d}\tau_{gs} = \rho_R(\boldsymbol{\gamma})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\gamma} = \rho(\boldsymbol{\alpha}_0)\,\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}_0$$

其中右密度函数 $\rho_R(\boldsymbol{\gamma})$ 为

$$\rho_R(\boldsymbol{\gamma}) = \frac{\rho(\boldsymbol{\alpha}_0)}{J_R(\boldsymbol{\beta})} \tag{10.1.11}$$

$J_R(\boldsymbol{\beta})$ 为 Jacobi 行列式，

$$J_R(\boldsymbol{\beta}) = \begin{vmatrix} \left.\dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_1}\right|_{\alpha=\alpha_0} & \cdots & \left.\dfrac{\partial f_r(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_1}\right|_{\alpha=\alpha_0} \\ \vdots & & \vdots \\ \left.\dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_r}\right|_{\alpha=\alpha_0} & \cdots & \left.\dfrac{\partial f_r(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_r}\right|_{\alpha=\alpha_0} \end{vmatrix} \tag{10.1.12}$$

如果 $J_L(\boldsymbol{\beta}) = J_R(\boldsymbol{\beta})$，则左不变积分等于右不变积分，于是群上不变积分(10.1.6)成立. 在群空间内可定义一个密度函数

$$\rho(\boldsymbol{\gamma}) = \rho(\boldsymbol{\alpha}_0)/J((\boldsymbol{\beta})) \tag{10.1.13}$$

可以证明对于紧致 Lie 群满足这个条件. 由定理 10.1.1 知道连通紧致单 Lie 群的不可约酉表示都是有限维的，因而它们满足积分形式的广义正交定理，

$$\int_G D^{(j)}(g)_{\mu\nu} D^{(i)}(g)^*_{\mu'\nu'}\,\mathrm{d}\tau_g = \frac{\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}\delta_{ji}}{n_j}\int_G \mathrm{d}\tau_g \tag{10.1.14}$$

其中 n_j 为不可约表示 $D^{(j)}$ 的维数.

同样特征标的正交定理为

$$\int_G \chi^{(i)}(g)\chi^{(i)}(g)^* \mathrm{d}\tau_g = \delta_{ij}\int_G \mathrm{d}\tau_g \tag{10.1.15}$$

下面举两个简例说明群上不变积分问题.

例 1 2 维旋转群 $O(2)$.

它是一单参数紧致 Lie 群，参数为旋转角 α，则

$$R(\alpha_1)R(\alpha_2) = R(\alpha_1 + \alpha_2)$$

于是合成函数为

$$\alpha_3 = \alpha_1 + \alpha_2$$

可得到 Jacobian 为 $J_R = J_L = 1$，单位元为 $\alpha_1 = 0$，密度函数为 $\rho(0)$，因而存在群上不变积分.

例 2 1 维 Euclide 群.

这是一个二参数的非紧致 Lie 群，群元素为

$$g(\alpha) = \{\alpha_1 | \alpha_2\}$$

乘法规则为

$$g(\alpha)g(\beta) = \{\alpha_1 | \alpha_2\}\{\beta_1 | \beta_2\} = \{\alpha_1\beta_1 | \alpha_1\beta_2 + \alpha_2\}$$

因而合成函数为

$$\gamma_1 = f_1(\alpha, \beta) = \alpha_1\beta_1, \quad \gamma_2 = f_2(\alpha, \beta) = \alpha_1\beta_2 + \alpha_2$$

由此得到

$$J_L(\gamma) = \begin{pmatrix} \beta_1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \beta_1, \quad J_R(\gamma) = \begin{pmatrix} \beta_1 & 0 \\ 0 & \beta_1 \end{pmatrix} = \beta_1^{\ 2}$$

这表明 $J_L(\gamma) \neq J_R(\gamma)$，即不存在群上不变积分.

10.2 半单 Lie 代数的表示与权

10.2.1 半单 Lie 代数的表示与权

若 $\{H_i, i = 1, 2, \cdots, r, E_\alpha\}$ 是半单 Lie 代数 g 的 C-W 基，则 g 为下列元素集合：

$$g = \{a^i H_i + a^\alpha E_\alpha \mid a^i, a^\alpha \in \mathbf{C}\} \tag{10.2.1}$$

在 n 维表示空间 V_A 中，它们为 $n \times n$ 的矩阵，即

$$A(g) = \{a^i A(H_i) + a^\alpha A(E_\alpha)\} \tag{10.2.1'}$$

表示矩阵 $A(H_i)$，$A(E_\alpha)$ 满足如下交换关系：

$$\begin{cases} [A(H_i), A(H_j)] = 0 \\ [A(H_i), A(E_\alpha)] = a^i A(E_\alpha) \\ [A(E_\alpha), A(E_{-\alpha})] = a^i A(H_i) \\ [A(E_\alpha), A(E_\beta)] = \begin{cases} N_{\alpha\beta} A(E_{\alpha+\beta}), & \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta} \in \Sigma \\ 0, & \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta} \notin \Sigma \end{cases} \end{cases} \tag{10.2.2}$$

空间 V 为半单 Lie 代数 g 的表示空间，空间 V 中的矢量记为 $|U\rangle$. 由于 Lie 代数 g 的

Cartan 算子 $H_i(i=1, 2, \cdots, r)$是相互交换的，即$[H_i, H_j]=0$，因而在表示空间中可找到 r 个 Cartan 算子 $H_1, H_2, \cdots, H_r$ 的共同本征矢量，它这种共同本征矢量为

$$|U_{(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \alpha_r)}\rangle$$

它们在 H_i 作用下为

$$H_i|U_{(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_r)}\rangle=\lambda_i|U_{(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)}\rangle \tag{10.2.3}$$

这组 λ_i 可看成 r 维矢量空间 Δ 中的一个矢量，记为 $\boldsymbol{\Lambda}=(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$，$\boldsymbol{\Lambda}\in\Delta$，称 $\boldsymbol{\Lambda}$ 为表示空间 V 中矢量$|U_{(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)}\rangle$的权，并把$|U_{(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_r)}\rangle$记为$|U_{\Lambda}\rangle$.

容易看到如把 H_i 写为行矩阵，即

$$H=(H_1, H_2, \cdots, H_r) \tag{10.2.4}$$

则

$$H|U_{\Lambda}=(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_r)|U_{\Lambda}=\boldsymbol{\Lambda}|U_{\Lambda}\rangle \tag{10.2.5}$$

由于$[H_i, E_\alpha]=\alpha_i E_\alpha$ 或$[H, E_\alpha]=\boldsymbol{\alpha}E_\alpha$，可看到

$$HE_\alpha|U_{\Lambda}\rangle=E_\alpha H|U_{\Lambda}\rangle+\boldsymbol{\alpha}E_\alpha|U_{\Lambda}\rangle=(\boldsymbol{\Lambda}+\alpha)|U_{\Lambda}\rangle \tag{10.2.6}$$

这表明 $H_i|U_{\Lambda}\rangle$仍然是权，为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的本征矢量，而 $E_\alpha|U_{\Lambda}\rangle$的权为 $\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\alpha}$.

下面可以证明具有不同权的本征矢量是线性无关的.

定理 10.2.1　如果半单 Lie 代数 g 在表示空间 V_{Λ} 上存在一系列权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(i)}$，$i=1, 2, \cdots, p$，相应本征矢量为$|U_{\Lambda^{(i)}}\rangle$，即

$$H_k|U_{\Lambda^{(i)}}\rangle=\lambda_k^{(i)}|U_{\Lambda^{(i)}}\rangle \quad 或 \quad H|U_{\Lambda^{(i)}}\rangle=\boldsymbol{\Lambda}^{(i)}|U_{\Lambda^{(i)}}$$

权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(i)}=(\lambda_1^{(i)}, \lambda_2^{(i)}, \cdots, \lambda_r^{(i)})$. 如果还有一个权为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的本征矢量$|U\rangle$，而且 $\boldsymbol{\Lambda}$ 与 $\boldsymbol{\Lambda}^{(i)}$不同，则本征矢量$|U\rangle$与$|U_{\Lambda^{(i)}}\rangle$线性无关.

证明　反证法. 假定$|U\rangle$与$|U_{\Lambda^{(i)}}\rangle$线性相关，则

$$|U\rangle=\sum_i \alpha_i|U_{\Lambda^{(i)}}\rangle \tag{10.2.7}$$

定义算子

$$\hat{P}=\prod_k \mu^{(i)}(H_i-\lambda_i^{(k)}) \tag{10.2.8}$$

其中$\mu^{(i)}$为任意复数. 用算子 $\hat{P}$ 作用于$|U\rangle$，则得到

$$\hat{P}|U\rangle=\prod_k \mu^{(i)}(\lambda_i-\lambda_i^{(k)})|U\rangle$$

λ_i 为$|U\rangle$的权的分量. 另一方面

$$\hat{P}|U\rangle=\hat{P}\sum_j \alpha_j|U_j\rangle=\sum_j \alpha_j\prod_k \mu^{(i)}(\lambda_i^{(i)}-\lambda_i^{(k)})|U_j\rangle=0$$

因为在积 $\prod_k \mu^{(i)}(\lambda_i^{(i)}-\lambda_i^{(k)})$ 中总存在 $\lambda_i^{(i)}-\lambda_i^{(i)}=0$ 的项，因此

$$\prod_k \mu^{(k)}(\lambda_i^{(i)}-\lambda_i^{(k)})|U\rangle=0$$

而 $\lambda_i\neq\lambda_i^{(k)}$($\boldsymbol{\Lambda}$ 与 $\boldsymbol{\Lambda}^{(k)}$全不相同)，$\mu^{(k)}$是任意复数. 因而只能$|U\rangle=0$，这就证明了除$|U\rangle=0$外，(10.2.7)不能成立，因而证明了此定理.

由这个定理可看到在 n 维表示空间中最多只能有 n 个权. 一个权可以有 ν 个本征矢量，即权是退化的，退化度 ν 称为这个权的重数. 如果权是非退化的，则称之为单权.

为了对表示空间中有限的权排列一个顺序，称第一个非零分量 λ_i 为正值的权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 为正权. 对于两个权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{\Lambda}^{(2)}$，如果

$$\lambda_1^{(1)} - \lambda_1^{(2)} = \lambda_2^{(1)} - \lambda_2^{(2)} = \cdots = \lambda_{i-1}^{(1)} - \lambda_{i-1}^{(2)} = 0, \quad \lambda_i^{(1)} - \lambda_i^{(2)} > 0$$

则称 $\boldsymbol{\Lambda}^{(1)}$ 比 $\boldsymbol{\Lambda}^{(2)}$ 高，于是可在全部权中排列出一个最高的权，称为最高权(highest weight). 一个不可约表示 A 的全部权的集合记为 Δ_A，对于具体的不可约表示权综合 Δ_A 是完全确定的.

10.2.2 权与根的关系

半单 Lie 代数一定表示的权和标记这个 Lie 代数结构的根都是 r 维向量，它们之间存在着重要的关系. 下面的定理揭示了这种关系.

定理 10.2.2 若 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是半单 Lie 代数 g 一定表示 A 的权，$\boldsymbol{\alpha}$ 为它的根系 Σ 中的一个根，$|U_\Lambda\rangle$ 为权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 对应的本征矢量，如果 $E_\alpha|U_\Lambda\rangle \neq 0$，则 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\Lambda}$ 也是表示 A 的一个权，与之对应的本征矢量为 $E_\alpha|U_\Lambda\rangle$；如果 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\Lambda}$ 不是权，则 $E_\alpha|U_\Lambda\rangle = 0$.

证明 由交换关系

$$[H, E_\alpha] = \boldsymbol{\alpha} E_\alpha \quad (H = (H_1, H_2, \cdots, H_r))$$

得到

$$HE_\alpha|U_\Lambda\rangle = (E_\alpha H + \boldsymbol{\alpha} E_\alpha)|U_\Lambda\rangle = (\boldsymbol{\Lambda} + \boldsymbol{\alpha})E_\alpha|U_\Lambda\rangle$$

若

$$E_\alpha|U_\Lambda\rangle \neq 0$$

则 $E_\alpha|U_\Lambda\rangle$ 为 H 的本征矢量，本征值为 $\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\alpha}$，亦即 $\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\alpha}$ 是一个权. 若 $E_\alpha|U_\Lambda\rangle = 0$，则 $\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\alpha}$ 不是权. 这就证明了本定理.

表示空间 V_A 可分解为一定权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的本征矢量张成的子空间，即 $V_A^\Lambda \subset V_A$，V_A^Λ 是由权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的本征矢量 $|U_\Lambda\rangle$ 张开的子空间. 因为权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 具有不同退化度，不同权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 张成的子空间维数不同. 因而

$$E_\alpha|U_\Lambda\rangle \in V_A^{\Lambda+\alpha}, \quad \text{若 } \boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\alpha} \text{ 是权}$$

$$E_\alpha|U_\Lambda\rangle = 0, \quad \text{若 } \boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\alpha} \text{ 不是权}$$

如果表示 A 是不可约表示，由定理 10.2.2 可得到一个推论，即表示空间可分解为

$$V_A = \sum_{\Lambda \in \Delta_A} \oplus V_A^\Lambda \tag{10.2.9}$$

也就是说半单 Lie 代数 g 的不可约表示 A 的表示空间 V_A 是全部权所标记的子空间的直和.

权和根之间的关系，还存在如下的定理.

定理 10.2.3 如果 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是半单 Lie 代数 g 的表示 A 的一个权；$\boldsymbol{\alpha}$ 为 g 的一个根，则：

(1) $\dfrac{2(\boldsymbol{\Lambda\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha\alpha})}$ 为整数，$\boldsymbol{\Lambda} - \dfrac{2(\boldsymbol{\Lambda\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha\alpha})}$ 也是权，而且与 $\boldsymbol{\Lambda}$ 有相同的重数，称 $\boldsymbol{\Lambda} - \dfrac{2(\boldsymbol{\Lambda\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha\alpha})}$ 为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的等价权；

(2) 如果 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是单权，则存在 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的含 $\boldsymbol{\alpha}$ 的权链

$$\boldsymbol{\Lambda} - q\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\Lambda} - (q-1)\boldsymbol{\alpha}, \cdots, \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\alpha}, \cdots, \boldsymbol{\Lambda}+p\boldsymbol{\alpha}$$

而$\boldsymbol{\Lambda}-(q+1)\boldsymbol{\alpha}$，$\boldsymbol{\Lambda}+(p+1)\boldsymbol{\alpha}$均不是权，而且

$$\frac{2(\boldsymbol{\Lambda\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha\alpha})}=q-p \tag{10.2.10}$$

证明　与定理 9.5.1 的证明相似，令$\boldsymbol{\Lambda}$为 Lie 代数g表示A的一个权，相应本征矢为$|U_{\Lambda}\rangle$，$\boldsymbol{\alpha}$为g的一个根，$\boldsymbol{\alpha}\in\Sigma$，则

$$E_{-\alpha}|U_{\Lambda}\rangle=C|U_{\Lambda-\alpha}\rangle=|U'_{\Lambda-\alpha}\rangle\neq 0 \tag{10.2.11}$$

其中$|U_{\Lambda-\alpha}$为权为$\boldsymbol{\Lambda}-\boldsymbol{\alpha}$的归一化本征矢量，$C$为归一化常数的倒数，$|U'_{\Lambda-\alpha}\rangle$为非归一化体征矢量，

$$E_{-\alpha}|U'_{\Lambda-\alpha}\rangle=|U'_{\Lambda-2\alpha}\rangle$$

如此下去可得到

$$E_{-\alpha}|U'_{\Lambda-j\alpha}\rangle=|U'_{\Lambda-(j+1)\alpha}\rangle$$

由于权是有限的，这种过程到

$$E_{-\alpha}|U'_{\Lambda-q\alpha}\rangle=0 \tag{10.2.12}$$

即$\boldsymbol{\Lambda}-q\boldsymbol{\alpha}$是权，而$\boldsymbol{\Lambda}-(q+1)\boldsymbol{\alpha}$不是权.

令

$$E_{\alpha}|U'_{\Lambda-(j+1)\alpha}\rangle=\mu_{j+1}|U'_{\Lambda-j\alpha}\rangle \tag{10.2.13}$$

μ_{j+1}为常数，由此可得到

$$\begin{aligned}\mu_{j+1}|U'_{\Lambda-j\alpha}\rangle&=E_{\alpha}|U'_{\Lambda-(j+1)\alpha}\rangle=E_{\alpha}E_{-\alpha}|U'_{\Lambda-j\alpha}\rangle\\&=E_{-\alpha}E_{\alpha}|U'_{\Lambda-j\alpha}\rangle+\alpha^{i}H_{i}|U'_{\Lambda-j\alpha}\rangle\\&=[\mu_{j}+\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\Lambda}-j\boldsymbol{\alpha})]|U'_{\Lambda-j\alpha}\rangle\end{aligned} \tag{10.2.14}$$

而

$$\mu_{j+1}=\mu_{j}+(\boldsymbol{\alpha\Lambda})-j(\boldsymbol{\alpha\alpha})\quad(j\geqslant 1) \tag{10.2.15}$$

与定理 9.5.1 的证明一样，令$\mu_0=0$，即假定$\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\alpha}$不是权，可得到

$$\mu_{j}=j(\boldsymbol{\alpha\Lambda})-\frac{j(j-1)}{2}(\boldsymbol{\alpha\alpha})$$

另一方面由于$|U'_{\Lambda-(q-1)\alpha}\rangle=0$，因而$\mu_{q+1}=0$，于是由(10.2.15)式得到

$$(\boldsymbol{\alpha\Lambda})=\frac{q}{2}(\boldsymbol{\alpha\alpha})\quad 或\quad \frac{2(\boldsymbol{\alpha\Lambda})}{(\boldsymbol{\alpha\alpha})}=q \tag{10.2.16}$$

这就证明了此定理的第一部分，即$\frac{2(\boldsymbol{\alpha\Lambda})}{(\boldsymbol{\alpha\alpha})}=q$，$q$为整数，而且$\boldsymbol{\Lambda}-q\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\Lambda}-\frac{2(\boldsymbol{\alpha\Lambda})}{(\boldsymbol{\alpha\alpha})}\boldsymbol{\alpha}$也是权.

如果$\boldsymbol{\Lambda}$是单权，即只有一个本征矢量$|U_{\Lambda}\rangle$用E_{α}作用于$|U_{\Lambda}\rangle$可得到

$$E_{\alpha}|U_{\Lambda}\rangle=|U'_{\Lambda+\alpha}\rangle=0$$

$$E_{\alpha}|U'_{\Lambda+\alpha}\rangle=|U'_{\Lambda+2\alpha}\rangle=0$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$E_{\alpha}|U'_{\Lambda+(p-1)\alpha}\rangle=|U'_{\Lambda+p\alpha}\rangle=0$$

$$E_{\alpha}|U'_{\Lambda+p\alpha}\rangle=0$$

即$\Lambda+\alpha$，$\Lambda+2\alpha$，…，$\Lambda+p\alpha$是权，而$\Lambda+(p+1)\alpha$不是权.

此时令$\Lambda+p\alpha=\Lambda'$，则$\Lambda'+\alpha$不是权. 重复上述论证，可得到

$$\frac{2(\alpha\Lambda')}{(\alpha\alpha)}=p+q \quad 或 \quad \frac{2(\alpha\Lambda)}{(\alpha\alpha)}=-q+p$$

这就证明了定理的第二部分，即存在权列

$$\Lambda-q\alpha,\ \Lambda-(q-1)\alpha,\ \cdots,\ \Lambda,\ \Lambda+\alpha,\ \cdots,\ \Lambda+p\alpha$$

至于Λ与$\Lambda-\frac{2(\Lambda\alpha)}{(\alpha\alpha)}\alpha$两个权有相同重数(退化度)，这里就不证明了，有兴趣的读者可参阅万哲先著《李代数》.

这个定理证明了对任一个权Λ，而$\Lambda-\frac{2(\Lambda\alpha)}{(\alpha\alpha)}\alpha$，$\alpha\in\Sigma$，也是权，即对于Lie代数$g$的任一个根$\alpha$，权空间中存在一个线性变换

$$S_\alpha:\ \Lambda\to\Lambda'=\Lambda-\frac{2(\Lambda\alpha)}{(\alpha\alpha)}\alpha \tag{10.2.17}$$

Weyl证明了这些线性变换具有仿射反射的形式，它使垂直于α的超平面中的所有向量不变，而且将α变换成$-\alpha$. 这些反射S_α生成一个有限的线性变换群，称为Weyl群. 显然Weyl群由$r+1$个元素构成，r为Lie代数的秩，可把根α只取r个素根，Weyl群为

$$S_\alpha=\{e_1,\ S_{\alpha_1},\ S_{\alpha_2},\ \cdots,\ S_{\alpha_r}|\alpha_i\in\Pi\}$$

由Weyl群的变换所得到的权称为等价权，上述定理证明了等价权Λ与Λ'有相同的重数.

10.2.3 半单Lie代数不可约表示的标记

1. 半单Lie代数不可约表示概要

半单Lie代数g的C-W基为$\{H_i, i=1, 2, \cdots, r;\ E_\alpha, \alpha\in\Sigma\}$，作为线性Lie代数，它作用于一定的$n$维空间$V_A$，在空间选定基矢后，Lie代数的基都表现为$n\times n$的矩阵，仍然用$H_i$和$E_\alpha$描写这些表示矩阵，一般称Cartan子代数的算子$H_i$为Cartan算子，$E_\alpha$为根算子. 对于表示空间$V_A$，可求出Cartan算子$H_i(i=1, 2, \cdots, r)$的共同本征矢量$\{|k(M)M\rangle\}$，$M$为权，使

$$H_i|k(M)M\rangle=\mu_i|k(M)M\rangle$$

μ_i为权M的第i个分量，对于退化权M，$k(M)$标记它的退化度，$k(M)=1, 2, \cdots, k_m$，表示对应同一个权M的k_m个不同的本征矢量. 对于n维表示空间$\{|k(M)M\rangle\}$共有n个基矢$|k(M)M\rangle$. 以V_A^M标记V_A的权为M的子空间V_A^M，V_A^M对H_i是不变子空间，即

$$H_i|k(M)M\rangle\in V_A^M$$

而根算子E_α则具有性质

$$E_\alpha|k(M)M\rangle\begin{cases}\in V_A^{M+\alpha}, & 若\ M+\alpha\in\Delta_A\\ =0, & 若\ M+\alpha\notin\Delta_A\end{cases}$$

Δ_A为表示A的权系.

若表示是不可约表示，则V_A中不存在Lie代数g的不变子空间，于是V_A可表示为

不可约表示权系的所有权的子空间的直和，即

$$V_{\Lambda} = \sum_{M \in \Delta} \oplus V_{\Lambda}^{M}$$

这些 Cartan 算子的共同本征矢是线性无关的，因而它们构成表示空间的基矢.

E_{α} 作用于权 $\boldsymbol{M}$，则成为权为 $\boldsymbol{M}$ 的基矢，如果 $\boldsymbol{M}+\boldsymbol{\alpha}$ 也是权，则使之成为权为 $\boldsymbol{M}+\boldsymbol{\alpha}$ 的基矢，如果 $\boldsymbol{M}+\boldsymbol{\alpha}$ 不是权则为零. 因而 E_{α}($\boldsymbol{\alpha}$ 为正根)是使权增加的算子，$E_{-\alpha}$是使权下降的算子，也就是说 $E_{\pm\alpha}$具有权的升降算子的作用，它们使不同权的子空间中的基矢相互转化.

任一不可约表示的权系，都有一个最高权，最高权是非退化的(见定理 10. 5. 2)，以 $\boldsymbol{\Lambda}$ 记最高权，则最高权的基矢为$|\boldsymbol{\Lambda}\rangle$，因而

$$E_{\alpha}|\boldsymbol{\Lambda}\rangle = 0, \quad \boldsymbol{\alpha} \text{ 为正根}$$

相互等价的不可约表示有相同的最高权，因而可用最高权来标记不可约表示. 这样，以最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 标记的不可约表示的基矢$\{|k(\boldsymbol{M})\boldsymbol{M}\rangle\}$可示记为$\{|\boldsymbol{\Lambda},\ k(\boldsymbol{M})\boldsymbol{M}\rangle\}$，$\boldsymbol{\Lambda}$ 为最高权，代表所属的不可约表示，$\boldsymbol{M}$ 是具体权 $\boldsymbol{M}$ 所属的基矢，$k(\boldsymbol{M})$标记同属于退化权 $\boldsymbol{M}$ 的不同基矢.

2. 半单 Lie 代数不可约表示的标记

为了标记半单 Lie 代数的不可约表示，下面介绍一个重要定理.

定理 10. 2. 4(最高权定理)　半单 Lie 代数 g 的不可约表示 A 的最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是单权，其它权可表示为

$$\boldsymbol{\Lambda} - \boldsymbol{\alpha}_i - \boldsymbol{\alpha}_j - \boldsymbol{\alpha}_k \cdots, \quad \boldsymbol{\alpha}_i \in \Pi \text{ 为素根}$$

而且 g 的两个等价的不可约表示 A_1 和 A_2 的最高权相等.

这个定理的证明可参阅 G. Racah“Group Theorg and Spectroscopy”.

这个定理说明不可约表示可用它的最高权来标记.

关于最高权，Dynkin 证明了下面的定理，即

定理 10. 2. 5　构成半单 Lie 代数 g 的不可约表示 A 的最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的充要条件是

$$\Lambda_{\alpha_i} = \frac{2(\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}_i)}{(\boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{\alpha}_i)} = \lambda_i \tag{10.2.18}$$

为非负整数，其中 $\boldsymbol{\alpha}_i \in \Pi$ 是 g 的素根. 若$|U_{\Lambda}\rangle$是最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的基矢，则

$$(E_{-\alpha_i})^k|U_{\Lambda}\rangle \begin{cases} =0, & k > \lambda_i \\ \neq 0, & k \leqslant \lambda_i \end{cases}$$

这个定理的证明读者可参阅万哲先著《李代数》.

由于最高权为不等价不可约表示的标记，亦即不等价不可约表示各自具有自己的互不相同最高权，因而可由本定理给出的 $\Lambda_{\alpha_i} = \lambda_i (i=1,\ 2,\ \cdots,\ r)$来标记半单 Lie 代数的不可约表示.

于是可在素根构成的半单 Lie 代数的 Dynkin 图上，在代表相应素根 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 的圈式点上面标记 μ_i，从而就由 Dynkin 图表示出了相应的不可约表示，即描述最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的 μ_i 标出了最高 $\boldsymbol{\Lambda}$.

10.3 典型 Lie 代数不可约表示的标记及其维数

10.3.1 单 Lie 代数的 Chevalley 基

C-W 基在讨论半单 Lie 代数结构上面是十分方便的. 然而对于描述单 Lie 代数的表示，Chevalley 基更加方便，下面讨论 Chevalley 基.

秩为 r 的单 Lie 代数 g 的第 m 个素根为 $\boldsymbol{\alpha}_m$，用它可引入 $3r$ 个 g 的生成元，即

$$\begin{cases} h_{\alpha_m} = \dfrac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_m \boldsymbol{\alpha}_m)}(\boldsymbol{\alpha}_m H) \\ e_{\alpha_m} = \sqrt{\dfrac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_m \boldsymbol{\alpha}_m)}} E_{\alpha_m} \qquad (m = 1, 2, \cdots, r) \\ e_{-\alpha_m} = \sqrt{\dfrac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_m \boldsymbol{\alpha}_m)}} E_{-\alpha_m} \end{cases} \tag{10.3.1}$$

其中 H 为 Cartan 子代数中的元素，E_{α_m}，$E_{-\alpha_m}$ 为 C-W 基中相应于素根 $\boldsymbol{\alpha}_m$ 和 $-\boldsymbol{\alpha}_m$ 的元素. 其中

$$(\boldsymbol{\alpha}_m, \boldsymbol{\alpha}_m) = \alpha_m^i \alpha_{m_i}, \qquad \boldsymbol{\alpha}_m H = \alpha_m^i H_i$$

α_{m_i} 为根空间向量 $\boldsymbol{\alpha}_m$ 的协变分量，α_m^i 为逆变分量. 容易看到(10.3.1)式定义的生成元满足交换关系

$$\begin{cases} [h_{\alpha_m}, h_{\alpha_j}] = 0 \\ [h_{\alpha_m}, e_{\pm\alpha_j}] = \pm A_{m_j} e_{\pm\alpha_j} \\ [e_{\alpha_m}, e_{-\alpha_j}] = \delta_{m_j} h_{\alpha_m} \end{cases} \tag{10.3.2}$$

其中 A_{m_j} 为(9.7.5)式定义的 Cartan 矩阵的矩阵元. 这种交换关系十分简单.

这 $3r$ 个元素并未充满整个 Lie 代数，其它生成元可由(10.3.2)式得到，即

$$e_{\alpha_m \cdots \alpha_j \alpha_k} = [e_{\alpha_m} \cdots [e_{\alpha_j}, e_{\alpha_k}]] \tag{10.3.3}$$

定理 10.2.5 给出的(10.2.18) 式，由 Chevalley 基可看到 μ_i 为基矢 $|U_\Lambda\rangle$ 对于 h_{α_i} 的权的分量，即

$$h_{\alpha_i} | U_\Lambda\rangle = \frac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_i \boldsymbol{\alpha}_i)}(\boldsymbol{\alpha}_i H) | U_\Lambda\rangle = \frac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_i \boldsymbol{\alpha}_i)}(\boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\alpha}_i) | U_\Lambda\rangle = \lambda_i | U_\Lambda\rangle \tag{10.3.4}$$

这表明如果选择 Chevalley 基，最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的分量 λ_i 为非负整数. 因而可使用 Chevalley 基下的最高权的分量$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_r)$标记半单 Lie 代数的不可约表示.

由(10.3.4)式可看到 Chevalley 基下权的分量 μ_i 实质上是在根空间(亦即权空间)选取 r 个归一化素根$\left\{\dfrac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)}\boldsymbol{\alpha}_i, i = 1, 2, \cdots, r\right\}$为基矢，权 $\boldsymbol{M}$ 是在这组基矢下的分量.

10.3.2 典型 Lie 代数不可约表示的标记

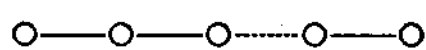
1. 典型 Lie 代数 A_n

典型 Lie 代数 A_n 与特殊线性 Lie 代数 $sl(n+1)$ 同构，$su(n+1)$ 是它的紧致实形.

它的 n 个素根为

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \boldsymbol{e}_i - \boldsymbol{e}_{i+1}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

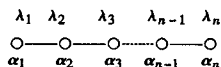
Dynkin 图为



素根的内积为$(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i) = 2$. 因而由(9.8.7)式定义的 C-W 基可得到(10.3.1)定义的 Chevalley 基为

$$\begin{cases} h_{\alpha_j} = \dfrac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_j \boldsymbol{\alpha}_j)}(\boldsymbol{\alpha}_j H) = E_{jj} - E_{j-1,j+1} \\ e_{\alpha_j} = \left[\dfrac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_j \boldsymbol{\alpha}_j)}\right]^{1/2} E_{\alpha_j} = E_{j,j+1} \\ e_{-\alpha_j} = \left[\dfrac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_j \boldsymbol{\alpha}_j)}\right]^{1/2} E_{-\alpha_j} = E_{j+1,j} \end{cases} \tag{10.3.5}$$

以 Chevalley 基下的最高权 $\boldsymbol{\Lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$表示它的不可约表示，并把 n 个分量 λ_i 记在 Dynkin 图上，即



代表最高权为$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$的不可约表示.

对于非负整数 λ_i 定义

$$\Lambda_i = \sum_{k=i}^{n} \lambda_k, \quad \sum_{i=1}^{n} \Lambda_i = N \tag{10.3.6}$$

可见 $\Lambda_1 \geqslant \Lambda_2 \geqslant \Lambda_3 \cdots \geqslant \Lambda_n \geqslant 0$，这恰是第七章讨论的对正整数 N 的一组分割，$[\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n]$同样也可代表不可约表示$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$，第十二章将看到$[\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n]$恰是 $SU(n)$群不可约表示的 Young 图.

由(10.3.6)式可解出

$$\lambda_1 = \Lambda_1 - \Lambda_2, \ \lambda_2 = \Lambda_2 - \Lambda_3, \ \cdots, \ \lambda_{n-1} = \Lambda_{n-1} - \Lambda_n, \ \lambda_n = \Lambda_n$$

对于 Lie 代数 A_n(或 $su(n+1)$)，由 Chevalley 自交换算子

$$h_{\alpha_j} = \frac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_j \boldsymbol{\alpha}_j)}(\boldsymbol{\alpha}_j H) = E_{jj} - E_{j+1,j+1}, \quad j = 1, 2, \cdots, n$$

可得到

$$\begin{aligned} h_{\alpha_j} | U_\Lambda \rangle &= \lambda_j | U_\Lambda \rangle = (E_{ii} - E_{i+1,i+1}) | U_\Lambda \rangle \\ &= (\Lambda_j - \Lambda_{j+1}) | U_\Lambda \rangle \end{aligned}$$

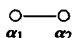
这表明

$$E_{jj} | U_\Lambda \rangle = \Lambda_j | U_\Lambda \rangle$$

即$[\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n]$为算子$\{E_{jj} = H_j, j = 1, 2, \cdots, n\}$的权.

例　Lie 代数 $A_2 \simeq su(3)$的不可约表示.

Lie 代数 $A_2 \simeq su(3)$，相应 Lie 群为 $SU(3)$. 它的素根为 $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2$，$\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3$，($\boldsymbol{e}_1 = (1, 0, 0)$，$\boldsymbol{e}_2 = (0, 1, 0)$，$\boldsymbol{e}_3 = (0, 0, 1)$). $(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1) = 2$，$(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_2) = 2$，$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2) = -1$. Dynkin 图为



以最高权(Λ_1, Λ_2)标记它的不可约表示. 按定义

$$\lambda_1=\frac{2(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\alpha}_1)}{(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1)}=(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\alpha}_1), \quad \lambda_2=\frac{2(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\alpha}_2)}{(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_2)}=(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\alpha}_2)$$

$\boldsymbol{\Lambda}$ 为最高权, (Λ_1, Λ_2)为 Chevally 基下最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的表示, Λ_1, Λ_2 为非负整数.

全部素根$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2)$构成 Lie 代数$A_2$ 根空间的基矢, 因而最高权$\boldsymbol{\Lambda}$ 可在这个基矢中展开为

$$\boldsymbol{\Lambda}=\Lambda_{\alpha_1}\boldsymbol{\alpha}_1+\Lambda_{\alpha_2}\boldsymbol{\alpha}_2$$

由此可得到

$$\begin{aligned}\Lambda_1&=(\Lambda_{\alpha_1}\boldsymbol{\alpha}_1+\Lambda_{\alpha_2}\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_1)=2\Lambda_{\alpha_1}-\Lambda_{\alpha_2}\\ \Lambda_2&=(\Lambda_{\alpha_1}\boldsymbol{\alpha}_1+\Lambda_{\alpha_2}\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_2)=-\Lambda_{\alpha_1}+2\Lambda_{\alpha_2}\end{aligned}$$

由这个方程可解出

$$\Lambda_{\alpha_1}=\frac{2\lambda_1+\lambda_2}{3}, \quad \Lambda_{\alpha_2}=\frac{1}{3}(\lambda_1+2\lambda_2)$$

因而最高权在素根坐标系中为

$$\boldsymbol{\Lambda}=\frac{1}{3}(2\lambda_1+\lambda_2)\boldsymbol{\alpha}_1+\frac{1}{3}(\lambda_1+2\lambda_2)\boldsymbol{\alpha}_2$$

如果不可约表示为(1, 0)在 Dynkin 图上标为

$$\overset{1}{\circ}\!\!-\!\!-\!\!\circ$$

此时最高权为 $\boldsymbol{\Lambda}=\frac{2}{3}\boldsymbol{\alpha}_1+\frac{1}{3}\boldsymbol{\alpha}_2$.

如果不可约表示为(0, 1), 在 Dynkin 上标为

$$\circ\!\!-\!\!-\!\!\overset{1}{\circ}$$

最高权为 $\boldsymbol{\Lambda}=\frac{1}{3}\boldsymbol{\alpha}_1+\frac{2}{3}\boldsymbol{\alpha}_2$.

对于不可约表示$(\lambda_1, \lambda_2)=(1, 0)$, 此时(10.3.6)式给出的 $\Lambda_1=\lambda_1=1$, $\Lambda_2=\lambda_1+\lambda_2=1$, 因而$[\Lambda_1, \Lambda_2]=[1, 1]$为 Young 图$\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$描述的 $SU(3)$群的不可约表示. 不可约表示$(\lambda_1, \lambda_2)=(0, 1)$, $\Lambda_1=0$, $\Lambda_2=1$, 即$[1, 0]$为 Young 图$\square$所代表的不可约表示.

2. 典型 Lie 代数 B_n

典型 Lie 代数 B_n 的 Chevalley 基由(9.8.14)式定义的 C-W 基可以得到

$$\begin{cases}h_{\alpha_j}=H_j-H_{j+1}=\mathrm{i}(I_{2j,2j-1}-I_{2j+2,2j+1}), \quad j=1, 2, \cdots, n-1\\ h_{\alpha_n}=2H_n=2\mathrm{i}I_{2n,2n-1}\\ e_{\pm\alpha_j}=\frac{1}{2}\{\mathrm{i}(I_{2j+1,2j-1}+I_{2j+2,2j})\mp(I_{2j+1,2j}-I_{2j+2,2j-1})\}\\ e_{\pm\alpha_n}=\mathrm{i}\,I_{2n+1,2n}\pm I_{2n+1,2n-1}\end{cases} \tag{10.3.7}$$

其中 I_{ij}由(9.8.12)式定义. 由此得到 Chavalley 基下最高权 $\boldsymbol{\Lambda}=(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$, 其中

$$\begin{aligned}h_{\alpha_j}|U_\Lambda\rangle&=\lambda_j|U_\Lambda\rangle=i\,(I_{2j,2j-1}-I_{2j+2,2j+1})|U_\Lambda\rangle\\ h_{\alpha_n}|U_\Lambda\rangle&=\lambda_n|U_\Lambda\rangle=2i\,I_{2n,2n-1}|U_\Lambda\rangle\end{aligned}$$

C-W 基下的权为 $\boldsymbol{\Lambda}=(\Lambda_1,\Lambda_2,\cdots,\Lambda_n)$，由(9.8.14)式得到

$$H_j|U_\Lambda\rangle=i\,I_{2j,2j-1}|U_\Lambda\rangle=\Lambda_j|U_\Lambda\rangle,\ j=1,2,\cdots,n$$

因而

$$\begin{cases}\lambda_j=\Lambda_j-\Lambda_{j+1}, & j=1,2,\cdots,n-1\\ \lambda_n=2\Lambda_n\end{cases}\tag{10.3.8}$$

由(10.3.8)式可解出

$$\Lambda_i=\sum_{j=i}^{n-1}\lambda_j+\lambda_n/2,\quad i=1,2,\cdots,n-1$$

$$\Lambda_n=\lambda_n/2$$

因而 $\Lambda_1\geqslant\Lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\Lambda_n\geqslant0$，若 λ_n 为偶数，Λ_i 为正整数，若 λ_n 为奇数，Λ_i 为半整数，它们都可用来标记高权，从而标记不可约表示.

用 Lie 代数 B_n 的 Dynkin 图表示不可约表示为

λ_1—λ_2—λ_3—…—λ_{n-2}—λ_{n-1}═λ_n

与之相应的也可用 $\boldsymbol{\Lambda}=(\Lambda_1,\Lambda_2,\cdots,\Lambda_n)$ 描述不可约表示，此时出现半整数表示，它为旋表示.

3. 典型 Lie 代数 C_n

由(9.8.15)式可得到 Lie 代数 C_n 的 Chevalley 基为

$$\begin{cases}h_{\alpha_j}=H_j-H_{j+1}=E_{jj}-E_{j+1,j+1}-E_{n+j,n+j}+E_{n+j+1,n+j+1}\\ h_{\alpha_n}=H_n=E_{nn}-E_{2n,2n}\\ e_{\alpha_j}=E_{j,j+1}-E_{n+j+1,n+j}\\ e_{-\alpha_j}=E_{j+1,j}-E_{n+j,n+j+1}, \quad j=1,2,\cdots,n-1\\ e_{\alpha_n}=E_{n,2n}\\ e_{-\alpha_n}=E_{2n,n}\end{cases}\tag{10.3.9}$$

其中 H_j 为 Lie 代数 C-W 基的 Cartan 算子.

因而最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 在这种基下的分量为 $\boldsymbol{\Lambda}=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$，即

$$h_{\alpha_j}|U_\Lambda\rangle=(H_j-H_{j+1})|U_\Lambda\rangle=\lambda_j|U_\Lambda\rangle=(\Lambda_j-\Lambda_{j+1})|U_\Lambda\rangle$$

$$h_{\alpha_n}|U_\Lambda\rangle=H_n|U_\Lambda\rangle=\lambda_n|U_\Lambda\rangle=\Lambda_n|U_\Lambda\rangle$$

其中 $[\Lambda_1\geqslant\Lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\Lambda_n]$ 为 C-W 基下的最高权. 因此

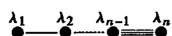
$$\lambda_j=\Lambda_j-\Lambda_{j-1},\ j=1,2,\cdots,n-1,\ \lambda_n=\Lambda_n\tag{10.3.10}$$

由此可得到

$$\begin{cases}\Lambda_i=\sum_{j=i}^{n}\lambda_i, & i=1,2,\cdots,n-1\\ \Lambda_n=\lambda_n\end{cases}\tag{10.3.11}$$

因而 $\Lambda_1\geqslant\Lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\Lambda_n\geqslant0$，而且 Λ_i 也是正整数，表示相同最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的两种形式 $(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$ 和 $[\Lambda_1,\Lambda_2,\cdots,\Lambda_n]$ 同样都可标记不可约表示.

用 Dynkin 图标记这种不可约表示为



4. 典型 Lie 代数 D_n

由(9.8.18)式 Lie 代数 D_n 的 C-W 基可得到它的 Chevalley 基的 Cartan 算子为

$$\begin{cases} h_{\alpha_j} = H_j - H_{j+1} \\ h_{\alpha_n} = H_{n-1} + H_n \end{cases} \tag{10.3.12}$$

H_j 为 C-W 基下的 Cartan 算子，因而最高权的分量为

$$h_{\alpha_j} | U_\Lambda\rangle = (H_j - H_{j+1}) | U_\Lambda\rangle = \lambda_j | U_\Lambda\rangle = (\Lambda_j - \Lambda_{j+1}) | U_\Lambda\rangle$$

$$h_{\alpha_n} | U_\Lambda\rangle = (H_{n-1} + H_n) | U_\Lambda\rangle = \lambda_n | U_\Lambda\rangle = (\Lambda_{n-1} + \Lambda_n) | U_\Lambda\rangle$$

由此得到

$$\lambda_j = \Lambda_j - \Lambda_{j+1},\quad i = 1, 2, \cdots, n-1,\quad \lambda_n = \Lambda_{n-1} + \Lambda_n \tag{10.3.13}$$

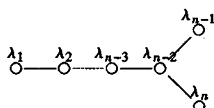
从中可解出

$$\Lambda_j = \sum_{i=j}^{n-2} \lambda_i + (\lambda_{n-1} + \lambda_n)/2,\quad j = 1, 2, \cdots, n-2$$

$$\Lambda_{n-1} = (\lambda_{n-1} + \lambda_n)/2,\quad \Lambda_n = (\lambda_n - \lambda_{n-1})/2$$

因而 $\Lambda_1 \geqslant \Lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant |\Lambda_n| \geqslant 0$，其中 $\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_{n-1}$ 为正数，Λ_n 可正可负. 当 $\lambda_{n-1} + \lambda_n$ 为偶数时，$\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n$ 为整数；当 $\lambda_{n-1} + \lambda_n$ 为奇数时，$\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n$ 为半整数，也是旋表示.

用它标记不可约表示的 Dynkin 图为



在上述四种典型 Lie 代数中，最高权在 C-W 基下的表示式 $\boldsymbol{\Lambda} = [\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n]$ 均具有性质

$$\Lambda_1 \geqslant \Lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant |\Lambda_n| \geqslant 0$$

而且除 D_n 外，它们都是正整数，因而通常用 $[\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n]$ 标记不可约表示. 而 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$ 表示最高权的方便之处在于它们是在根空间基矢 $(\frac{2}{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)}\boldsymbol{\alpha}_i,\ i = 1, 2, \cdots, n)$ 下的分量，在计算 $\boldsymbol{\Lambda}$ 与 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 的内积时十分方便，因而在计算不可约表示维数时是十分有用的.

10.3.3 典型 Lie 代数不可约表示的维数

定理 10.1.1 已指出紧致单 Lie 代数不可约酉表示都是有限维表示，因而讨论典型 Lie 代数不可约酉表示的维数是十分重要的. Weyl 证明了以最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 标记的不可约表示的维数公式(参见 H. Weyl 著“The Classical Groups”).

下面不加证明地给出这些维数公式.

半单紧致 Lie 群 G 的以最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 标记的不可约表示 Γ 的维数 $D(\Gamma)$ 为

$$D(\Gamma) = \prod_{\alpha \in \Sigma^+} \frac{(\boldsymbol{\Lambda} + \boldsymbol{g}, \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{g}, \boldsymbol{\alpha})} \tag{10.3.14}$$

其中 g 为正根 $\boldsymbol{\alpha}^+$ 之和的一半，即

$$g=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\in\Sigma^+}\boldsymbol{\alpha}^+,\quad \boldsymbol{\alpha}^+\text{ 为正根},\ \boldsymbol{\alpha}\text{ 为根},\ \boldsymbol{\alpha}\in\Sigma$$

经过具体计算，对四个典型 Lie 代数系列可得到下面的结果.

1. Lie 代数 A_n 或 Lie 群 $SU(n+1)$ 不可约表示的维数

对于最高权为 $(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$ 的 Lie 代数 A_n 或 Lie 群 $SU(n+1)$ 的不可约表示维数为

$$D_{A_n}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)=\prod_{i,j}\left(1+\frac{\lambda_i+\lambda_{i+1}+\cdots+\lambda_{i+j}}{j+1}\right),$$

$$j=0,1,2,\cdots,n-1,\quad i=1,2,\cdots,n-j \tag{10.3.15}$$

或等价地表示为

$$D_{A_n}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)=\prod_{i,j}\left(1+\frac{\lambda_i+\lambda_{i+1}+\cdots+\lambda_j}{j+1-i}\right)$$

$$j=0,1,2,\cdots,n,\quad i=1,2,\cdots,j \tag{10.3.15'}$$

下面给出(10.3.15)式的几个具体例子.

1° $A_1(SU(2))$

此时只有一个 λ_1，于是由(10.3.15)式得到

$$D_{A_1}(\lambda)=1+\lambda,\quad \lambda\text{ 为非负整数}$$

如果令 $\lambda=2j$，则

$$D_{A_1}(j)=1+2j$$

这正是众所周知的 $SU(2)$ 群不可约表示 (j) 的维数，j 为半整数或整数.

2° $A_2(SU(3))$

此时最高权为 (λ_1,λ_2)，由(10.3.15)式得到

$$\begin{aligned}D_{A_2}(\lambda_1,\lambda_2)&=(1+\lambda_1)(1+\lambda_2)\left(1+\frac{\lambda_1+\lambda_2}{2}\right)\\&=\frac{1}{2}(\Lambda_1-\Lambda_2+1)(\Lambda_2+1)(\Lambda_1+2)\end{aligned}$$

3° $A_3(SU(4))$

此时最高权为 $(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$，由(10.3.15)式得到

$$\begin{aligned}D_{A_3}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)&=\frac{1}{12}(\lambda_1+1)(\lambda_2+1)(\lambda_3+1)\\&\quad\cdot(\lambda_1+\lambda_2+2)(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3+3)(\lambda_2+\lambda_3+2)\\&=\frac{1}{12}(\Lambda_1-\Lambda_2+1)(\Lambda_2-\Lambda_3+1)\\&\quad\cdot(\Lambda_1-\Lambda_3+2)(\Lambda_3+1)(\Lambda_2+2)(\Lambda_1+3)\end{aligned}$$

在上面的公式中也用 $\Lambda_i=\sum_{j=i}^{n}\lambda_j$ 给出了相应的表达式.

注意(10.3.15)式中按 $j=0,1,2,\cdots n-1$，$i=1,2,\cdots,n-j$ 对一定 j 取尽允许的 i.

2. Lie 代数 $B_n(SO(2n+1)$群)不可约表示的维数

典型 Lie 代数 B_n, $n\geqslant 2$(当 $n=1$ 时, B_1 与 A_1 局部同构. 当 $n=2$ 时, B_2 与 C_2 局部同构). 最高权为$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$时, 不可约表示的维数为

$$D_{B_n}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$$
$$=D_{A_n}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)\prod_{i,j}\left(1+\frac{\lambda_i+\lambda_{i+1}+\cdots+2\lambda_j+\cdots+2\lambda_{n-1}+\lambda_n}{2n+1-i-j}\right)$$
$$j=0, 1, 2, \cdots, n-1, \quad i=1, 2, \cdots, j \tag{10.3.16}$$

下面给出 $n=2$, $n=3$ 的具体公式.

1° $B_2(SO(5)$群)

最高权 $\boldsymbol{\Lambda}=(\lambda_1, \lambda_2)$, 此时(10.3.16)式第二项只有 $i=j=1$ 的项($j=1, 2, \cdots, n-1$, 当 $n=2$ 时, $j=1$, $i=1, 2, \cdots, j$)于是

$$D_{B_2}(\lambda_1, \lambda_2)=D_{A_2}(\lambda_1, \lambda_2)\left(1+\frac{2\lambda_1+\lambda_2}{3}\right)$$

2° $B_3(SO(7)$群)

最高权 $\boldsymbol{\Lambda}=(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$, (10.3.16)式第二项中只存在$j=1$, $i=1$; $j=2$, $i=1$; $j=2$, $i=2$ 的三项, 于是

$$D_{B_3}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$$
$$=D_{A_3}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)\left(1+\frac{2\lambda_1+2\lambda_2+\lambda_3}{5}\right)\left(1+\frac{\lambda_1+2\lambda_2+\lambda_3}{4}\right)\left(1+\frac{2\lambda_2+\lambda_3}{3}\right)$$

3. 典型 Lie 代数 $C_n(sp(2n)$群)不可约表示的维数

典型 Lie 代数 C_n, $n\geqslant 3$. 最高权$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$标记的不可约表示的维数为

$$D_{C_n}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$$
$$=D_{A_n}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)\prod_{i,j}\left(1+\frac{\lambda_i+\lambda_{i+1}+\cdots+2\lambda_j+\cdots+2\lambda_n}{2n+2-i-j}\right),$$
$$j=0, 1, 2, \cdots, n, \quad i=1, 2, \cdots, j-1 \tag{10.3.17}$$

1° Lie 代数 C_2 不可约表示维数

最大权为(λ_1, λ_2), 此时(10.3.17)式第二项只包括$j=1$, $i=1$ 的项, 于是

$$D_{C_2}(\lambda_1, \lambda_2)=D_{A_2}(\lambda_1, \lambda_2)\left(1+\frac{\lambda_1+2\lambda_2}{3}\right)$$

因为 C_2 的 Dynkin 图为

λ_1 ●═○ λ_2
α_1 α_2

而 B_2 的 Dynkin 图为

λ_1 ○═● λ_2
α_1 α_2

因而 C_2 与 $D_2(\lambda_1, \lambda_2)$互换, 因而 $D_{C_2}(\lambda_1, \lambda_2)=D_{B_2}(\lambda_2, \lambda_1)$, B_2 与 C_2 相互同构.

2° Lie 代数 C_3 不可约表示的维数

最高权为$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$, (10.3.17)式中只存在$j=2$, $i=1$;$j=3$, $i=1$;$j=3$, $i=2$ 的

项，于是得到

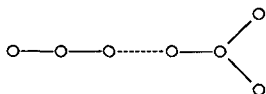
$$D_{C_3}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$$
$$=D_{A_3}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)\left(1+\frac{\lambda_1+2\lambda_2+2\lambda_3}{4}\right)\left(1+\frac{\lambda_1+2\lambda_2+2\lambda_3}{5}\right)\left(1+\frac{\lambda_2+2\lambda_3}{3}\right)$$

4. Lie 代数 D_n($O(2n)$群)不可约表示的维数

以最高权 $\boldsymbol{\Lambda}=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$标记的 Lie 代数 D_n 的不可约表示的维数为

$$D_{D_n}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$$
$$=\frac{2D_{A_n}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)}{2+\lambda_{n-1}+\lambda_n}\prod_k\left(1+\frac{\lambda_k+\lambda_{k+1}+\cdots+\lambda_{n-2}+\lambda_n}{n-k}\right)$$
$$\cdot\prod_{j,i}\left(1+\frac{\lambda_i+\lambda_{i+1}+\cdots+2\lambda_j+\cdots+2\lambda_{n-2}+\lambda_{n-1}+\lambda_n}{2n-i-j}\right)$$
$$k=1,2,\cdots,n-2,\quad j=2,3,\cdots,n-2,\quad i=1,2,\cdots,j-2 \tag{10.3.18}$$

Lie 代数 D_n 的 Dynkin 图为



可见，当 $n=2$ 时，Dynkin 图为$\substack{\circ\\ \circ}$，它是两个 Lie 代数 A_1 的直和，即 $D_2=A_1\oplus A_1$；当 $n=3$ 时，Dynkin 图为 ο—ο—ο，为 Lie 代数 A_3，因而只有 $n\geqslant4$ 的 Lie 代数 D_n.

1° Lie 代数 D_3 不可约表示的维数

最大权$(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$，由(10.3.18)式可看到第二个连乘项只能 $k=1$，第二个连乘项不存在，因而

$$D_{D_3}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)=\frac{2D_{A_3}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)}{2+\lambda_2+\lambda_3}(1+(\lambda_2+\lambda_3)/2)$$
$$=D_{A_3}(\lambda_1,\lambda_2)$$

2° Lie 代数 D_4 不可约表示的维数

最高权为$(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)$. (10.3.18)式中关于 k 的连乘项为 $k=1,2$，第二个连乘项只有 $j=2$，$i=1$ 的项. 因而

$$D_{D_4}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)=\frac{2D_{A_4}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)}{2+\lambda_3+\lambda_4}\left(1-\frac{\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3+\lambda_4}{3}\right)$$
$$\cdot\left(1+\frac{\lambda_2+\lambda_3+\lambda_4}{2}\right)\left(1+\frac{\lambda_1+2\lambda_2+\lambda_3+\lambda_4}{5}\right)$$

10.3.4 由最高权计算权系的方法

以最高权 $\boldsymbol{\Lambda}=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$表示的不可约表示的维数，可通过$(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$利用上节的公式求出. 由定理 10.2.2 可知以最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 表示的不可约表示的全部权都是 $\boldsymbol{\Lambda}$ 减去一些根而得到的，因而可由最高权求出它所代表的 $D(\boldsymbol{\Lambda})$ 维的不可约表示的全部 $D(\boldsymbol{\Lambda})$个权(包括退化权)，即这个不可约表示的权系.

由最高权求出全部权系的方法是 Dynkin 建立的.

由定理 10.2.3 知道，对于权 $\boldsymbol{M}$，$\frac{2(\boldsymbol{M},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}$为一整数，$\boldsymbol{\alpha}\in\Sigma$. 而定理 10.2.5 说明对最大权 $\boldsymbol{\Lambda}$，λ_i 为非负整数. 因而定义

$$\delta(\boldsymbol{M}) = 2\sum_{\alpha\in\Pi}\mu_\alpha, \quad \mu_\alpha = \frac{2(\boldsymbol{M},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}, \boldsymbol{\alpha}\in\Pi \tag{10.3.19}$$

它为整数，而当 $\boldsymbol{M}=\boldsymbol{\Lambda}$ 为最高权时

$$\delta(\boldsymbol{\Lambda}) = 2\sum_{\alpha\in\Pi}\lambda_\alpha, \quad \lambda_\alpha = \frac{2(\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}, \boldsymbol{\alpha}\in\Pi \tag{10.3.19'}$$

$\delta(\boldsymbol{\Lambda})$为正整数，令

$$r(\boldsymbol{M}) = \frac{1}{2}(\delta(\boldsymbol{\Lambda}) - \delta(\boldsymbol{M})) \tag{10.3.20}$$

因为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 为最高权，因而 $r(\boldsymbol{M})$为正整数，$r(\boldsymbol{M})$的意义是权 $\boldsymbol{M}$ 是从最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 中减去 $r(\boldsymbol{M})$ 个素根而得到的. 称 $r(\boldsymbol{M})=k$ 为权 $\boldsymbol{M}$ 的层次，第 k 个层次的权都是由最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 中减去 k 个素根而得到的权，以 $\Delta_A^{(k)}$ 表示以最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 代表的不可约表示 A 的 k 层次的权的集合，最高权为零层次的权，最低层次的权记为 T_A 层次. T_A 称为不可约表示 A 的高度，即不可约表示 A 的全部权有 T_A+1 个层次(包含 0 层次的 $\boldsymbol{\Lambda}$). 显然

$$r(\boldsymbol{\Lambda})=0, \quad r(\boldsymbol{\Lambda}')=T_A \tag{10.3.21}$$

$\boldsymbol{\Lambda}'$为最低权，它由 $\boldsymbol{\Lambda}$ 减去 T_A 个素根而构成.

于是不可约表示 A 的权系 Δ_A 可分解为各种层次的权集合的合集，即

$$\Delta_A = \Delta_A^{(0)}\cup\Delta_A^{(1)}\cup\Delta_A^{(2)}\cup\cdots\cup\Delta_A^{(T)} \tag{10.3.22}$$

定义 $S_k(A)$为不可约表示 A 的 k 层次的重复度之和，于是

$$S_0(A)+S_1(A)+\cdots+S_{T_A}(A)=D(A) \tag{10.3.23}$$

$D(A)$为不可约表示 A 的维数.

对于最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 和最低权 $\boldsymbol{\Lambda}'$，存在公式

$$\delta(\boldsymbol{\Lambda})+\delta(\boldsymbol{\Lambda}')=0 \tag{10.3.24}$$

由(10.3.20)式和(10.3.21)式可得到

$$\delta(\boldsymbol{\Lambda})+\delta(\boldsymbol{\Lambda}')=2T_A \tag{10.3.25}$$

由此得到

$$\delta(\boldsymbol{\Lambda})=T_A \tag{10.3.26}$$

即由 $\boldsymbol{\Lambda}$ 利用(10.3.20)可求出不可约表示的高度，而且

$$\delta(\boldsymbol{M})=T_A-2r(\boldsymbol{M}) \tag{10.3.27}$$

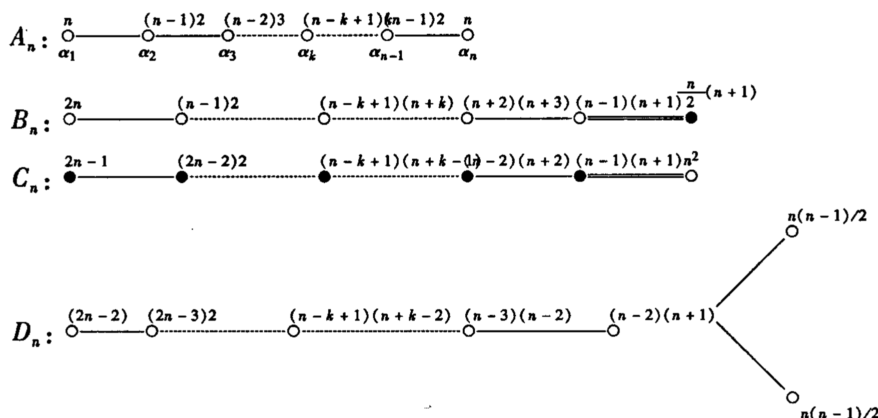
对于不可约表示 $\delta(\boldsymbol{M})$对所有权的奇偶性都是相同的. 当 $\delta(\boldsymbol{M})$为奇数时，称不可约表示为奇型的表示；$\delta(\boldsymbol{M})$为偶数时，称为偶型表示.

Dynkin 对寻求权系给出如下的两条定理，即

定理 10.3.1 如果 $\boldsymbol{\Lambda}$ 为半单 Lie 代数 g 的不可约表示 A 的最高权，则

$$T_A = \sum_{\alpha\in\Pi}r_\alpha\lambda_\alpha \tag{10.3.28}$$

对单 Lie 代数 Dynkin 在下图中给出了(10.3.28)式中 r_α 的数值：



把 r_α 标记在典型 Lie 代数的 Dynkin 图相应的素根的旁边. 于是，利用定理 10.3.1 就可计算出典型 Lie 代数不可约表示$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$的高度 T_φ.

定理 10.3.2　半单 Lie 代数 g 的不可约表示 A 的权系 Δ_A 各层次的重复度之和 $S_K(A)$呈纺锤形分布，即

$$S_K = S_{T-K},\quad S_r \geqslant S_{r-1} \geqslant \cdots \geqslant S_2 \geqslant S_1$$

这里

$$r = \begin{cases} \dfrac{T}{2}, & \text{对偶型表示} \\ \dfrac{T+1}{2}, & \text{对奇型表示} \end{cases}$$

由这条定理可得到 $S_r(A)$最大值，称为不可约表示的宽度.

利用这些结果和定理 10.2.3 就可由不可约表示 A 的最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 求出权系 Δ_A. 具体方法是逐层次求出 Δ_A^1, Δ_A^2, $\cdots$, Δ_A^{r-1}，此时$(r-1)$层次以下的权都是已知的了，这时再寻求 Δ_A^r 层次的权. 对 Δ_A^{r-1} 层次的每个权 $\boldsymbol{M}$，只须计算 $\boldsymbol{M}-\boldsymbol{\alpha}_i(\boldsymbol{\alpha}_i \in \Sigma)$是否属于 Δ_A 就可以了.

定理 10.2.3 第 2 点说明权 $\boldsymbol{M}$ 的含根 $\boldsymbol{\alpha}$ 的权链为

$$\boldsymbol{M}-q\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{M}-(q-1)\boldsymbol{\alpha},\ \cdots,\ \boldsymbol{M},\ \boldsymbol{M}+\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{M}+2\boldsymbol{\alpha},\ \cdots,\ \boldsymbol{M}+p\boldsymbol{\alpha}$$

$\boldsymbol{M}-(q+1)\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{M}+(p+1)\boldsymbol{\alpha}$ 都不是权，而且

$$\frac{2(\boldsymbol{M},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})} = q-p \tag{10.3.29}$$

因而对 $r-1$ 层次 Δ_A^{r-1} 中的任一权 $\boldsymbol{M}$，由于$(r-1)$以下层次的权全部求出了，它的含根 $\boldsymbol{\alpha}$ 的权列中的 p 是知道的($r-1$ 层次以下各层次的权包括了全部 $\boldsymbol{M}+k\boldsymbol{\alpha}$ 的权)，因而

$$\frac{2(\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})} + p > 0 \tag{10.3.30}$$

则说明(10.3.29)式中的 $q \geqslant 1$，因而含根 $\boldsymbol{\alpha}$ 的权列中包括 $\boldsymbol{M}-\boldsymbol{\alpha}$，即 $\boldsymbol{M}-\boldsymbol{\alpha} \in \Delta_A$. 因而由(10.3.30)式就可对 Δ_A^{r-1} 层次中的每个权 $\boldsymbol{M}$ 对每个根 $\boldsymbol{\alpha}$ 判断出 $\boldsymbol{M}-\boldsymbol{\alpha}$ 是否为权，于是就求出了 Δ_A^r. 如此就可全部找到权系 Δ_A 了.

例 1　计算 Lie 代数 $A_2(SU(3))$不可约表示(0, 1)的权系.

在前面，我们已得到了这个不可约表示的最高权为 $\boldsymbol{\Lambda} = \frac{1}{3}(\boldsymbol{\alpha}_1 + 2\boldsymbol{\alpha}_2)$. 由表 10.3.1

可查到对 Lie 代数 A_2(10.3.28)式中的 r 值为 $r_{\alpha_1}=2$, $r_{\alpha_2}=2$. 于是，由(10.3.8)式求出不可约表示(0, 1)的高度为

$$T_{(0,1)}=2$$

即存在三个层次的权集合，$\Delta_{(0,1)}=\Delta^0_{(0,1)}\cup\Delta^1_{(0,1)}\cup\Delta^2_{(0,1)}$.

首先来寻求集合 $\Delta^1_{(0,1)}$ 中的权. 由于 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是最高权，$\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\alpha}$ 不是权，对于含根 $\boldsymbol{\alpha}$ 的 $\boldsymbol{\Lambda}$ 权系(10.3.29)式中 $p=0$，因而

$$\frac{2(\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}=q$$

而对于最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 已知

$$\frac{2(\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\alpha}_1)}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}_1)}=0,\quad \frac{2(\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\alpha}_2)}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}_1)}=1$$

从而说明 $\boldsymbol{\Lambda}-\lambda_1\boldsymbol{\alpha}$ 不是权，而 $\boldsymbol{\Lambda}-\lambda_2\boldsymbol{\alpha}_2$ 是权，即

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{\Lambda}-\boldsymbol{\alpha}_2=\frac{1}{3}(\boldsymbol{\alpha}_1+2\boldsymbol{\alpha}_2)-\boldsymbol{\alpha}_2=\frac{1}{3}(\boldsymbol{\alpha}_1-\boldsymbol{\alpha}_2)\in\Delta^1_{(0,1)}$$

不可约表示(0, 1)的维数为 3，由(10.3.23)得到

$$S_0(0,1)+S_1(0,1)+S_2(0,1)=3$$

由定理 10.3.2 知道 $S_0(0,1)=S_2(0,1)=1$(最高权为单权 $S_0=1$)，因而 $S_1(0,1)=1$，说明 $\Delta^1_{(0,1)}$ 只有一个权.

最后从 $\boldsymbol{M}$ 出发，寻求 $\Delta^2_{(0,1)}$ 中的权，由于 $\boldsymbol{M}+\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\Lambda}\in\Delta_{(0,1)}$，因而说明含 $\boldsymbol{\alpha}_2$ 的 $\boldsymbol{M}$ 权列 $p=1$. 而

$$\frac{2(\boldsymbol{M},\boldsymbol{\alpha}_2)}{(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_2)}=\frac{2}{3}[(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)-(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_2)]/(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_2)=-1$$

因而(10.3.29)式中 $q=0$，$\boldsymbol{M}-\boldsymbol{\alpha}_2$ 不是权，对于 $\boldsymbol{\alpha}_1$，$\boldsymbol{M}+\boldsymbol{\alpha}_1$ 不是权，即(10.3.29)式中 $p=0$.

$$\frac{2(\boldsymbol{M},\boldsymbol{\alpha}_1)}{(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1)}=1,\quad q=1$$

于是

$$\boldsymbol{M}'=\boldsymbol{M}-\boldsymbol{\alpha}_1=-\frac{1}{3}(2\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2)\in\Delta^2_{(0,1)}$$

这样就全部找到了权系 $\Delta_{(0,1)}$.

$$\Delta_{(0,1)}=\left\{\frac{1}{3}(\boldsymbol{\alpha}_1+2\boldsymbol{\alpha}_2),\ \frac{1}{3}(\boldsymbol{\alpha}_1-\boldsymbol{\alpha}_2),\ -\frac{1}{3}(2\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2)\right\}$$

例 2 不可约表示(1, 0)的权系.

Lie 代数 A_2 不可约表示(1, 0)是三维表示，最高权为(1, 0)，高度也为 2，因而，只存在三个层次的权. 最高权为 $\boldsymbol{\Lambda}=\frac{1}{3}(2\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2)$. 由(10.3.29)式容易算出 $\boldsymbol{\Lambda}-\boldsymbol{\alpha}_2=\frac{1}{3}(-\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2)$是权，$\boldsymbol{\Lambda}-\boldsymbol{\alpha}_2$ 不是权. 最后再由 $\boldsymbol{\Lambda}-\boldsymbol{\alpha}_1$ 求出第二个层次的权. 因为对根 $\boldsymbol{\alpha}_1$，(10.3.29)式为

$$\frac{2(\Lambda-\alpha_1,\alpha_2)}{(\alpha_2,\alpha_2)}=q_2=1,\quad \frac{2(\Lambda-\alpha_1,\alpha_1)}{(\alpha_1,\alpha_1)}=q_1-1=-1,\quad q_1=0$$

因而$\Lambda-\alpha_1-\alpha_2=\frac{1}{3}(-\alpha_1-2\alpha_2)$是权，于是权系为

$$\Delta_{(0,1)}=\left\{\frac{1}{3}(2\alpha_1+\alpha_2),\ \frac{1}{3}(-\alpha_1+\alpha_2),\ \frac{1}{3}(-\alpha_1-2\alpha_2)\right\}$$

例 3　A_2 不可约表示(0, 2)的权系.

不可约表示(0, 2)是 6 维表示，它的最高权为 $\Lambda=\frac{1}{3}(2\alpha_1+4\alpha_2)$. 由(10. 3. 28)式可计算出它的高度 $T(0,2)=4$，有 5 个层次的权集合

$$S_0(0,2)=S_4(0,2)=1,$$
$$S_1(0,2)=S_3(0,2)=1,\ S_2(0,2)=2$$

它们描述了每个层次中权的数目.

首先由 Λ 求 $\Delta^{(1)}(0,2)$中的权，对于 Λ，(10. 3. 29)式中 $p=0$，而

$$\frac{2(\Lambda,\alpha_1)}{(\alpha_1,\alpha_1)}=0,\quad \frac{2(\Lambda,\alpha_2)}{(\alpha_2,\alpha_2)}=2$$

说明：

$$\Lambda-\alpha_1\notin\Delta_{(0,2)},\ M^{(1)}=\Lambda-\alpha_2=\frac{1}{3}(2\alpha_1+\alpha_2)\in\Delta_{(0,2)}$$

再由 $M^{(1)}=\frac{1}{3}(2\alpha_1+\alpha_2)$求第三个层次中的权. 由于 $M^{(1)}+\alpha_2$ 是权，$M^{(1)}+\alpha_1$ 不是权，因而(10. 3. 29)式变为

$$\frac{2(M^{(1)},\alpha_1)}{(\alpha_1,\alpha_1)}=q_1-p_1=q_1=1\quad(p_1=0)$$

$$\frac{2(M^{(1)},\alpha_2)}{(\alpha_2,\alpha_2)}=q_2-p_2=q_2-1=0\quad(q_2=0)$$

因而

$$M^{(2)}=M^{(1)}-\alpha_1=\frac{1}{3}(-\alpha_1+\alpha_2)\in\Delta_{(0,2)}$$

$$M^{(2)\prime}=M^{(1)}-\alpha_2=\frac{1}{3}(2\alpha_1-2\alpha_2)\in\Delta_{(0,2)}$$

这就得到了第三层次 Δ_2 中的两个权.

由 $M^{(2)}$和 $M^{(2)\prime}$的表达式可看到：

$$M^{(2)}+\alpha_1\text{ 是权},\quad M^{(2)}+2\alpha_1\text{ 不是权},\quad M^{(2)}+\alpha_2\text{ 不是权}$$

因而(10. 3. 29)式中 $p_1=1$，$p_2=0$. 同样，

$$M^{(2)\prime}+\alpha_2,\ M^{(2)\prime}+2\alpha_2\text{ 是权},\ M^{(2)\prime}+3\alpha_2\text{ 不是权},\quad M^{(2)\prime}+\alpha_1\text{ 不是权}$$

因而(10. 3. 29)式中 $p_1'=0$，$p_2'=2$.

$$\frac{2(M^{(2)},\alpha_1)}{(\alpha_1,\alpha_1)}=q_1-p_1=-1\quad(q_1=0)$$

$$\frac{2(\boldsymbol{M}^{(2)}, \boldsymbol{\alpha}_2)}{(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_2)} = q_2 - p_2 = q_2 = 1$$

$$\frac{2(\boldsymbol{M}^{(2)\prime}, \boldsymbol{\alpha}_1)}{(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1)} = q_1{}' - p_1{}' = q_1{}' = 2$$

$$\frac{2(\boldsymbol{M}^{(2)\prime}, \boldsymbol{\alpha}_2)}{(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_2)} = q_2{}' - p_2{}' = q_2{}' - 2 = -2 \quad (q_2{}' = 0)$$

由此得到

$$\boldsymbol{M}^{(3)} = \boldsymbol{M}^{(2)} - \boldsymbol{\alpha}_1 = \frac{1}{3}(-\boldsymbol{\alpha}_1 - 2\boldsymbol{\alpha}_2) = \boldsymbol{M}^{(3)\prime}$$
$$= \boldsymbol{M}^{(2)\prime} - \frac{1}{3}(-\boldsymbol{\alpha}_1 - \boldsymbol{\alpha}_2) \in \Delta_{(0,2)}$$

最后由于 $q_1' = 2$，$\boldsymbol{M}^{(2)\prime}$ 含 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 权系还包括权

$$\boldsymbol{M}^{(1)\prime} = \boldsymbol{M}^{(2)\prime} - 2\boldsymbol{\alpha}_1 = \frac{1}{3}(-4\boldsymbol{\alpha}_1 - 2\boldsymbol{\alpha}_2)$$

这是第 4 个层次中的权.

由上述讨论得到不可约表示(0, 2)的权系 $\Delta_{(0,2)}$ 为

$$\Delta_{(0,2)} = \left\{\frac{1}{3}(2\boldsymbol{\alpha}_1 + 4\boldsymbol{\alpha}_2), \frac{1}{3}(2\boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2), \frac{1}{3}(-\boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2),\right.$$
$$\left.\frac{1}{3}(2\boldsymbol{\alpha}_1 - 2\boldsymbol{\alpha}_2), \frac{1}{3}(-\boldsymbol{\alpha}_1 - \boldsymbol{\alpha}_2), \frac{1}{3}(-4\boldsymbol{\alpha}_1 - 2\boldsymbol{\alpha}_2)\right\}$$

10.3.5 Lie 代数 A_n 的反对称表示与对称表示

典型 Lie 代数以$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$表示的最高权，如果 n 个 λ_i 中只有

$$\lambda_i = \begin{cases} 1, & \text{当 } i = k \\ 0, & \text{当 } i \neq k,\ i = 1, 2, \cdots, k-1, k+1, \cdots, n \end{cases}$$

则它所标记的不可约表示称为基本表示(basic representaion). 用 Dynkin 图标记不可约表示时，基本表示只在 Dynkin 图的一个素根上有一个 1(其它素根上均为零，这些零并不标记出来). 在 Dynkin 图端点上为 1 的基本表示称为初等表示(elementary represen-taion).

对于 Lie 代数 A_n，它的基本表示的最高权为

$$(\underbrace{0, 0, \cdots 0, 1}_{k}, 0, 0, \cdots, 0)$$

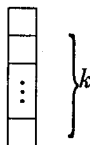
k 标记 $\lambda_k = 1$，其它为零.

这种最高权用(10.3.6)式定义的$[\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n]$标记则为$[1, 1, \cdots, 1, 0, \cdots 0] = [1^k, 0, 0, \cdots, 0]$，这种不可约表示为反对称表示. 这种不可约表示的维数，由(10.3.15′)式容易求出为

$$D_{A_n}(0, 0, \cdots, 0, 1_k, 0, \cdots, 0) = \binom{n+1}{k}$$

这便是相应 Lie 群 $SU(n+1)$不可约表示$[1^k]$的通常所给出的维数公式. 这种不可约表

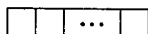
示的 Young 图为



对于最大权

$$(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n) = (k,0,0,\cdots,0) = [k,0,0,\cdots,0]$$

所标记的不可约表示，称为对称表示. 它的 Young 图为



是全对称表示. 由维数公式(10.3.15′)容易得到它的维数为

$$D_{A_n}((k,\ 0,\ \cdots,\ 0,\ 0)) = \binom{n+1+k}{k}$$

这是 $SU(n+1)$ 群对称表示$[k]$一般所知道的维数公式.

典型 Lie 代数 A_n, B_n, C_n, D_n 都有 n 个基本表示，其它例外 Lie 代数也有与它的 Dynking 图上素根数目相同的基本表示.

在理论上可以证明 Lie 代数的所有表示都可由 n 个基本表示的直积分解而得到. 而 n 个基本表示又可由 2 个或 3 个 Dynkin 图端点上为 1 的初等表示幂乘积的全反对称化和对称化而得到. 这些问题就不讨论了.

10.4 典型 Lie 代数的直积表示

10.4.1 直积表示

1. 典型 Lie 群的酉表示

Lie 代数 g 的 m 维表示，为 $m\times m$ 矩阵 $A(X)$, $X\in g$, 对于 n 维 Lie 代数 g 的一组基矢$(X_1,\ X_2,\ \cdots,\ X_n)$，表示矩阵 $A(X_i)$ 存在如下交换关系：

$$[A(X_i),\ A(X_j)] = C_{ij}^k A(X_k)$$

C_{ij}^k为 Lie 代数 g 的结构常数.

由 Lie 代数 g 的表示通过指数映射，可得到相应 Lie 群 G 的表示，表示矩阵为

$$M(\boldsymbol{\alpha}) = \exp[\alpha_i A(x_i)]$$

X_i 为 Lie 代数 g 的基矢，也是 Lie 群 G 的无穷小生成元. $\boldsymbol{\alpha}$ 为群参数，$M(\boldsymbol{\alpha})$为群元素 $g(\boldsymbol{\alpha})$的表示矩阵.

对于典型 Lie 代数 A_n, B_n, C_n, D_n 的实形 $su(n+1)$, $o(2n+1)$, $s_p(2n)$和 $o(2n)$, $A(X_i)$都是反 Hermitian 矩阵. 因而由它们的指数映射得到的典型群 $SU(n+1)$, $SO(2n+1)$, $S_P(2n)$, $SO(2n)$的表示矩阵都是酉矩阵, 因都是酉表示.

典型群都是紧致 Lie 群，由定理 10.1.1 可知这些群不可约酉表示都是有限维的，因而讨论典型 Lie 代数的有限维不可约表示，就全部讨论了典型群的所有不可约酉表示.

2. 典型 Lie 代数的直积表示

在上节中已讨论了典型 Lie 代数 g 有限维不可约表示 A 可由最高权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(0)}$ 来标记. 对一个 n 维不可约表示存在 n 个权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(0)}, \boldsymbol{\Lambda}^{(1)}, \boldsymbol{\Lambda}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{\Lambda}^{(n-1)}$, 构成这个表示的权系 Δ_A, 其中 $\boldsymbol{\Lambda}^{(0)}$ 为最高权, 它是单权. 其它$(n-1)$个权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(i)}(i=1,2,3,\cdots,n-1)$可能是退化权, 即若干个权是相同的, 表示空间 V_A 可分解为以权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(i)}$ 标记的子空间 $V_A^{\Lambda^{(i)}}$ 的直和, 即

$$V_A = \sum_{\Lambda \in \Delta_A} V_A^{(\Lambda)} \tag{10.4.1}$$

权系中的权可由最高权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(0)}$ 减去一定的根而得到.

不可约表示的基矢可表示为$\{|\beta_i \boldsymbol{\Lambda}^{(i)}\rangle\}$, $\boldsymbol{\Lambda}^{(i)}$ 为权系中的权, β_i 标记不同的退化权, 比如权 $\boldsymbol{\Lambda}^i$ 退化度为 k, $i=1,2,\cdots,k$. 这些基矢在 Lie 代数基矢 H_j, E_α 作用下

$$H_j | \beta_i \boldsymbol{\Lambda}^i\rangle = \Lambda_j^i | \beta_i \boldsymbol{\Lambda}^i\rangle \quad \text{或} \quad H_j V_A^\Lambda = \Lambda_j V_A^\Lambda$$

$$E_\alpha | \beta_i \boldsymbol{\Lambda}^i\rangle = \begin{cases} \Lambda_A^{\Lambda^i+\alpha}, & \boldsymbol{\Lambda}^i + \boldsymbol{\alpha} \in \Delta_A \\ 0, & \boldsymbol{\Lambda}^i + \boldsymbol{\alpha} \notin \Delta_A \end{cases} \tag{10.4.2}$$

Λ_j^i 为 $\boldsymbol{\Lambda}^i$ 的第 j 分量.

与有限群的直积表示一样, 也可定义 Lie 代数 g 的直积表示. 如果矩阵$\{A(X)\}$是 Lie 代数 g 的 n 维表示 A 的表示矩阵, $X \in g$. m 维矩阵$\{B(X)\}$是 Lie 代数 g 的表示 B 的表示矩阵, 定义矩阵的直积

$$C(X) = A(X) \otimes B(X)$$

为 Lie 代数 g 的直积表示, 记为 $C = A \otimes B$.

在有限群的直积表示中, 已指出矩阵 A 与 B 的直积 $C = A \otimes B$ 为 $n \times m$ 维的表示, 矩阵 C 是$(n \times m) \times (n \times m)$的矩阵, 它的矩阵元由 4 个指标标记, 即

$$c_{ij,kl} = a_{ik} b_{jl}, \quad i, k = 1, 2, \cdots, n, \quad j, l = 1, 2, \cdots, m$$

显然直积表示有如下性质:

(1) $A \otimes B = B \otimes A$;

(2) $(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$;

(3) $(A \oplus B) \otimes C = A \otimes C \oplus B \otimes C$.

如果表示 A 与 A'等价$(A \sim A')$, 表示 B 与 B'等价$(B \sim B')$, 则

$$A \otimes B = C, \quad A' \otimes B' = C', \quad C \sim C'$$

如果 Lie 代数 g 的 n 维表示 A 和 m 维表示 B 都是不可约的, 但是 $n \times m$ 维的直积表示 $C = A \otimes B$, 一般也是可约的. 这种可约表示可约化为不可约表示的直和, 即

$$A \otimes B = \sum_C \oplus d_{ab}^c C \tag{10.4.3}$$

其中 d_{ab}^c 为不可约表示 C 在直积表示 $A \otimes B$ 中出现的重复度.

直积表示的不可约表示分解是十分重要的问题, 从原则上讲, 这种分解归结为直积表示权系的最大权分解.

10.4.2 直积表示的权系与直积表示的分解

n 维典型 Lie 代数 g 以最高权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(1)}$ 标记的 m_a 维不可约表示 A 的权系为 Δ_A, 其中包

括 m_a 个权 $\Delta_A=\{\boldsymbol{\Lambda}^{(0)},\boldsymbol{\Lambda}^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\Lambda}^{(m_a)}\}$，$m_a$ 个权中除最高权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(0)}$ 外，其余 m_a-1 个权有若干个是相同的退化权. 以最高权 $\boldsymbol{M}^{(0)}$ 标记的 m_b 维不可约表示 B 的权系为 Δ_B，它包括 m_b 个权 $\boldsymbol{M}^{(0)},\boldsymbol{M}^{(1)},\cdots,\boldsymbol{M}^{(m_b)}$，其中，除 $\boldsymbol{M}^{(0)}$ 外，有若干退化的权.

直积表示 $A\otimes B$ 的表示空间为直积空间，

$$V_{A\otimes B}=V_A\otimes V_B=\sum_{\Lambda\in\Delta_A}\sum_{M\in\Delta_B}\oplus V_A^{\Lambda}\otimes V_B^{M} \tag{10.4.4}$$

Lie 代数 g 的 Cartan 算子 H_i 作用于表示空间为

$$\begin{aligned}H_iV_A^{\Lambda}\otimes V_B^{M}&=(H_iV_A^{\Lambda})\otimes V_B^{M}+V_A^{\Lambda}\otimes(H_iV_B^{M})\\&=(V_i+M_i)V_A^{\Lambda}\otimes V_B^{M}\end{aligned} \tag{10.4.5}$$

这说明 $V_A\otimes V_B$ 为 H_i 的不变空间，这个空间的权为 $\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{M}$. 直积空间 $V_{A\otimes B}$是权为 $\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{M}$ 的子空间的直和，因而直积表示的权系由 Δ_A 和 Δ_B 中任意两权的和构成. 从而得到直积表示 $A\otimes B$ 的权系 $\Delta_{A\otimes B}$由 $\boldsymbol{\Lambda}^{(i)}+\boldsymbol{M}^{(j)}$ 构成，有 m_am_b 个权. 其中有若干个权是重复的(即退化的).

直积表示不可约分解可分按如下三步进行:

(1) 在直积表示权系 $\Delta_{A\otimes B}$中选出最高权 $\boldsymbol{\Lambda}^{(0)}+\boldsymbol{M}^{(0)}$，它们分别为不可约表示 A 和 B 的最高权，当然它是 $\Delta_{A\otimes B}$的最高权，这就是直积表示 $A\otimes B$ 中包括的以 $\boldsymbol{\Lambda}^{(0)}+\boldsymbol{M}^{(0)}$ 为最高权的一个不可约表示. 然后按照这个最高权寻求出它所代表的不可约表示的权系.

(2) 在权系 $\Delta_{A\otimes B}$中除去以 $\boldsymbol{\Lambda}^{(0)}+\boldsymbol{M}^{(0)}$ 为最高权的权系后，在剩余的权中再找出一个最高权，这个最高权代表的不可约表示是直积表示 $A\otimes B$ 中包括的另一个不可约表示. 并用这个最高权寻求出以它为最高权的权系.

(3) 在权系 $\Delta_{A\otimes B}$中除去上述两个不可约表示的权系，在剩余的权中再重复上述处理，直至分解完毕.

这种处理只是直积表示不可约分解的处理原则. 实际使用中，特别是对高维数不可约表示的直积分解中，这种方法是十分复杂的，甚至是不可能的. 因而对具体的 Lie 代数或 Lie 群，都发展了直积分解的方便方法，比如对 $SU(n)$可用 Young 图表示不可约表示，用 Young 图直积的图形规则发展了直积分解方法(这种方法将在第十二章 $SU(n)$群不可约张量表示理论中讨论).

在 B. G. Wybourne 的专著"Symmetry Principles in Atomic Spectroscopy"给出了很多有用的直积分解表.

直积分解举例: Lie 代数 A_2 直积表示$(0, 1)\otimes(0, 1)$的分解.

在上节中已给出 Lie 代数 A_2 有两个素根 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2$，$(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1)=(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_2)=2$，$(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=-1$. 它们所代表的不可约表示$(0, 1)$维数为 3，最高权 $\boldsymbol{\Lambda}=\frac{1}{3}(\boldsymbol{\alpha}_1+2\boldsymbol{\alpha}_2)$，权系 $\Delta_{(0,1)}$为

$$\Delta_{(0,1)}=\left\{\boldsymbol{\Lambda}=\frac{1}{3}(\alpha_1+2\alpha_2),\ \boldsymbol{M}=\frac{1}{3}(\boldsymbol{\alpha}_1-\boldsymbol{\alpha}_2),\ \boldsymbol{M}'=-\frac{1}{3}(2\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2)\right\}$$

直积表示$(0, 1)\otimes(0, 1)$的权系 Δ 为 $\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\Lambda}$，$\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{M}$，$\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{M}'$，$\boldsymbol{M}+\boldsymbol{\Lambda}$，$\boldsymbol{M}+\boldsymbol{M}$，$\boldsymbol{M}+\boldsymbol{M}'$，$\boldsymbol{M}'+\boldsymbol{\Lambda}$，$\boldsymbol{M}'+\boldsymbol{M}$，$\boldsymbol{M}'+\boldsymbol{M}'$，由此得到 9 个权的集合为

$$\Delta = \left\{\frac{2\alpha_1 + 4\alpha_2}{3}, \frac{2\alpha_1 + \alpha_2}{3}, \frac{2\alpha_1 + \alpha_2}{3}, \frac{-\alpha_1 + \alpha_2}{3}, \frac{-\alpha_1 + \alpha_2}{3}, \frac{2\alpha_1 + 2\alpha_2}{3}, \frac{-\alpha_1 - 2\alpha_2}{3}, \frac{-\alpha_1 - 2\alpha_2}{3}, \frac{4\alpha_2 - 2\alpha_2}{3}\right\}$$

其中最高权为 $\Lambda = \frac{2\alpha_1 + 4\alpha_2}{3}$，它所代表的不可约表示为(0, 2)，是一个6维不可约表示. 在上节的例3中给出了以 Λ 为最高权的权系. 在直积(0, 1)×(0, 1)的权系 Δ 中去掉6个(0, 2)的权系 $\Delta_{(0,2)}$，还剩三个权

$$\frac{2\alpha_1 + 4\alpha_2}{3}, \quad \frac{2\alpha_1 + \alpha_2}{3}, \quad \frac{2\alpha_1 - 2\alpha_2}{3}$$

这正是最高权 $\Lambda^{(1)} = \frac{2\alpha_1 + 4\alpha_2}{3}$ 所代表的不可约表示(1, 0).

因而直积表示(0, 1)×(0, 1)的分解为

$$(0,1)\otimes(0,1) = (0,2)\oplus(1,0)$$

10.5 Casimir 算子及其本征值

10.5.1 Casimir 算子

在9.4.2节中定义了 Lie 代数 g 的 C-K 张量，即

$$g_{\lambda\sigma} = C^{\tau}_{\sigma\rho} C^{\rho}_{\lambda\tau} \tag{10.5.1}$$

其中 $C^{\tau}_{\sigma\rho}$ 为 Lie 代数 g 的结构常数. 根据定理9.4.1半单 Lie 代数 g 的 C-K 度规张量是非退化的，即

$$\det g \neq 0 \tag{10.5.2}$$

因而半单 Lie 代数的度规张量 g 存在逆矩阵 g^{-1}，

$$g^{-1}_{\lambda\sigma} g_{\sigma\tau} = g_{\sigma\tau} g^{-1}_{\sigma\tau} = \delta_{\lambda\tau}$$

一般把逆张量的矩阵元记为 $g^{\lambda\sigma}$，即

$$g^{\lambda\sigma} g_{\sigma\tau} = \delta^{\lambda}_{\tau}$$

可由度规张量 $g_{\sigma\tau}$ 的逆 $g^{\lambda\sigma}$ 定义 Casimir 算子.

定义 10.5.1 定义算子 $\hat{P}$ 为

$$\hat{P} = g^{\sigma\lambda} X_{\sigma} X_{\lambda} \tag{10.5.3}$$

为半单 Lie 代数 g 的 Casimir 算子，X_{σ}，X_{λ} 为半单 Lie 代数的基矢.

Casimir 算子具有一个重要的性质：半单 Lie 代数 g 的 Casimir 算子 $\hat{P}$ 与 Lie 代数 g 的所有元素都是交换的. 下面就来证明这一重要结果.

令 X_{τ} 是 Lie 代数 g 的一个基矢，则

$$\begin{aligned}[\hat{P}, X_{\tau}] &= g^{\rho\sigma}[X_{\rho} X_{\sigma}, X_{\tau}] \\ &= g^{\rho\sigma} X_{\rho}[X_{\sigma}, X_{\tau}] + g^{\rho\sigma}[X_{\rho}, X_{\tau}] X_{\sigma}\end{aligned}$$

$$=g^{\rho\sigma}C_{\sigma\tau}^{\lambda}X_{\rho}X_{\lambda}+g^{\rho\sigma}C_{\rho\tau}^{\lambda}X_{\lambda}X_{\sigma}$$
$$=g^{\rho\sigma}C_{\sigma\tau}^{\lambda}X_{\rho}X_{\lambda}+g^{\rho\sigma}C_{\rho\tau}^{\lambda}X_{\lambda}X_{\rho}$$

在上式的第二项交换一下 σ，ρ，由于 $g^{\sigma\rho}=g^{\rho\sigma}$，于是得到

$$[\hat{P},\ X_{\tau}]=g^{\rho\sigma}C_{\sigma\tau}^{\lambda}(X_{\rho}X_{\lambda}+X_{\lambda}X_{\rho}] \tag{10.5.4}$$

利用(9.4.20)式定义的反对称张量

$$C_{\nu\sigma\tau}=g_{\lambda\nu}C_{\sigma\tau}^{\lambda}$$

可得到

$$C_{\sigma\tau}^{\lambda}=g^{\lambda\nu}C_{\nu\sigma\tau} \tag{10.5.5}$$

由此得到

$$[\hat{P},\ X_{\tau}]=g^{\rho\sigma}g^{\lambda\nu}C_{\nu\sigma\tau}(X_{\rho}X_{\lambda}+X_{\lambda}X_{\rho})$$

在上式中对求和指标进行交换，即 $\rho\leftrightarrow\lambda$，$\nu\leftrightarrow\sigma$ 得到

$$\begin{aligned}[\hat{P},\ X_{\tau}]&=g^{\lambda\nu}g^{\rho\sigma}C_{\nu\sigma\tau}(X_{\lambda}X_{\rho}+X_{\rho}X_{\lambda})\\&=-g^{\lambda\nu}g^{\rho\sigma}C_{\nu\sigma\tau}(X_{\rho}X_{\lambda}+X_{\lambda}X_{\rho})\\&=-[\hat{P},\ X_{\tau}]=0\end{aligned} \tag{10.5.6}$$

$(C_{\sigma\nu\tau}=-C_{\nu\sigma\tau})$，这便证明了 $\hat{P}$ 与 Lie 代数中任意元素都交换.

Casimir 算子与 Lie 代数中任意元素都交换的性质是十分重要的，这一点在下面的讨论中将看到.

利用半单 Lie 代数的归一化 C-W 基，C-K 度规张量化为(9.4.20)式，于是(10.5.1)定义的 Casimir 算子变为

$$\hat{P}=g^{ij}H_iH_j+\sum_{\alpha\in\Sigma}E_{\alpha}E_{-\alpha} \tag{10.5.7}$$

其中 g^{ij}为由 Cartan 算子 H_i 决定的 Cartan 子代数的度规张量 g_{ij}的逆.

以半单 Lie 代数 g 的基矢为无穷生成元的 Lie 群 G 的群元素可表示为 Lie 代数 g 的元素的指数函数，因而 Lie 代数 g 的 Casimir 算子一定与 Lie 群 G 的所有元素都交换. 由 Schur 引理知道 Casimir 算子一定为恒等算子的常数倍，因而 Casimir 算子也称 Casimir 不变算子.

Racah 推广了上面定义的 Casimir 不变算子，定义了高阶 Casimir 不变算子. 他定义半单 Lie 代数 g 的新的基矢

$$X^{\alpha}=g^{\alpha\beta}X_{\beta} \tag{10.5.8}$$

利用它们定义算子

$$\hat{P}_i=C_{\alpha_1\beta_1}^{\beta_2}C_{\alpha_2\beta_2}^{\beta_3}\cdots C_{\alpha\beta_i}^{\beta_{1+i}}X^{\alpha_1}X^{\alpha_2}\cdots X^{\alpha_i},\quad i=2,\ 3,\ 4\cdots r-1 \tag{10.5.9}$$

称 $\hat{P}_i$ 为 i 阶 Casimir 算子，当 $i=2$ 时，

$$\hat{P}_2=C_{\alpha_1\beta_1}^{\beta_2}C_{\alpha_2\beta_2}^{\beta_1}X^{\alpha_1}X^{\alpha_2}=C_{\alpha_1\beta_1}^{\beta_2}C_{\alpha_2\beta_2}^{\beta_1}g^{\alpha_1\gamma_1}g^{\alpha_2\gamma_2}X_{\gamma_1}X_{\gamma_2}$$

由于 $C_{\alpha_1\beta_1}^{\beta_2}C_{\alpha_2\beta_2}^{\beta_1}=g_{\alpha_2\alpha_1}$，因而

$$C_{\alpha_1\beta_1}^{\beta_2}C_{\alpha_2\beta_2}^{\beta_1}g^{\alpha_1\gamma_1}=g_{\alpha_2\alpha_1}g^{\alpha_1\gamma_1}=\delta_{\alpha_2}^{\gamma_1}$$

于是

$$\hat{P}_2=\delta_{\alpha_2}^{\gamma_1}g^{\alpha_2\gamma_2}X_{\gamma_1}X_{\gamma_2}=g^{\gamma_1\gamma_2}X_{\gamma_1}X_{\gamma_2}=\hat{P}$$

这表明(10.5.9)式定义的广义 Casimir 算子中的二阶算子 $\hat{P}_2$ 就是(10.5.1)或定义的通常的 Casimir 算子. Racah 证明了 r 秩的半单 Lie 代数存在 r 个独立的广义 Casimir 不变算子, 对全部单 Lie 代数, Casimir 不变算子为

A_n: $\hat{P}_i$, $i=2, 3, \cdots, n+1$

B_n: $\hat{P}_i$, $i=2, 4, 6, \cdots, 2n$

C_n: $\hat{P}_i$, $i=2, 4, 6, \cdots, 2n$

D_n: $\hat{P}_i$, $i=2, 4, 6, \cdots, 2n-2, n$

G_2: $\hat{P}_i$, $i=2, 6$

F_4: $\hat{P}_i$, $i=2, 6, 8, 12$

E_6: $\hat{P}_i$, $i=2, 5, 6, 8, 9, 12$

F_7: $\hat{P}_i$, $i=2, 6, 8, 10, 12, 14, 18$

E_8: $\hat{P}_i$, $i=2, 8, 12, 14, 18, 20, 24, 30$

由于 Casimir 不变算子与 Lie 代数的所有元素都是交换的, 因而它们在半单 Lie 代数和半单 Lie 群的表示理论研究中是十分有用的, 可用它们的本征值标记不可约表示的基矢.

由于度规张量非退化是半单 Lie 代数的充要条件, 因而非半单 Lie 代数度规张量一定是退化的, 不存在逆. 这样便不能定义 Casimir 算子. 不过对于非半单 Lie 代数也可用其它方法定义与代数的所有元素都交换的算子, 一般称为不变算子. 这里就不进行讨论了.

10.5.2 二阶 Casimir 算子的本征值

1. 最高权所对应的基矢 $|\boldsymbol{\Lambda}\rangle$ 的 Casimir 算子的本征值

以最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 代表的不可约表示的基矢 $\{|\boldsymbol{\Lambda}, k(\boldsymbol{M})\boldsymbol{M}\rangle\}$ 中属于最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的基矢中有一个($\boldsymbol{\Lambda}$ 为单权 $k(\boldsymbol{\Lambda})=1$), 可简记为 $|\boldsymbol{\Lambda}\rangle$. 在 C-W 基中, 二阶 Casimir 算子 $\hat{P}_2$ 由(10.5.6)式表示, 它作用于 $|\boldsymbol{\Lambda}\rangle$ 为

$$\hat{P}_2|\boldsymbol{\Lambda}\rangle = g^{ij}H_iH_j|\boldsymbol{\Lambda}\rangle + \sum_{\alpha\in\Sigma}E_{\alpha}E_{-\alpha}|\boldsymbol{\Lambda}\rangle$$

因为若 $\boldsymbol{\alpha}$ 为正根, $E_{\alpha}|\boldsymbol{\Lambda}\rangle=0$, 于是上式可写为

$$\hat{P}_2|\boldsymbol{\Lambda}\rangle = g^{ij}H_iH_j|\boldsymbol{\Lambda}\rangle + \sum_{\alpha\in\Sigma^+}[\ ]E_{\alpha}, E_{-\alpha}]|\boldsymbol{\Lambda}\rangle \tag{10.5.10}$$

容易得到

$$g^{ij}H_iH_j|\boldsymbol{\Lambda}\rangle = g^{ij}\lambda_i\lambda_j|\boldsymbol{\Lambda}\rangle = \sum_i\lambda_i\lambda_i|\boldsymbol{\Lambda}\rangle = (\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\Lambda})|\boldsymbol{\Lambda}\rangle \tag{10.5.11}$$

λ_i, λ_j 为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的第 i 个和第 j 分量, $H_k|\boldsymbol{\Lambda}\rangle=\lambda_k|\boldsymbol{\Lambda}\rangle$, $(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\Lambda})$为最高权的内积(注意重复指标表示求和). 而

$$[E_{\alpha}, E_{-\alpha}]=\alpha^iH_i=\boldsymbol{\alpha}H, \quad H=(H_1, H_2, \cdots, H_r)$$

因而

$$\sum_{\alpha\in\Sigma^+}[E_\alpha, E_{-\alpha}]|\Lambda\rangle = \sum_{\alpha\in\Sigma^+}\alpha H|\Lambda\rangle$$
$$=2gH|\Lambda\rangle = 2(g, \Lambda)|\Lambda\rangle \qquad (10.5.12)$$

其中

$$g = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\in\Sigma^+}\alpha \qquad (10.5.13)$$

为正根和的一半.

最后得到

$$\hat{P}_2|\Lambda\rangle = (\Lambda+2g, \Lambda)|\Lambda\rangle \qquad (10.5.14)$$

2. Casimir 算子 $\hat{P}_2$ 对不可约表示 Λ 的所有其它基矢的本征值

以最高权 Λ 标记的不可约表示，全部基矢$\{|\Lambda, K(m)M\rangle\}$都可由基矢$|\Lambda\rangle$通过 $E_{-\alpha}$ 作用而得到. 比如若 $\Lambda-\alpha\in\Delta_\Lambda$($\Delta_\Lambda$ 为不可约表示 Λ 的权系)，则

$$E_{-\alpha}|\Lambda\rangle = a(\Lambda, -\alpha)|\Lambda, \Lambda-\alpha\rangle$$

$a(\Lambda, -\alpha)$为归一化常数. 因而任何基矢$|\Lambda, K(m)M\rangle$都可表示为特定算子函数 $f_m^k(-\alpha)$作用于$|\Lambda\rangle$的结果，即

$$|\Lambda, K(m)M\rangle = f_m^k(-\alpha)|\Lambda\rangle \qquad (10.5.15)$$

由于 $\hat{P}_2$ 与 Lie 代数的所有基矢都交换，因而

$$[\hat{P}_2, f_m^k(-\alpha)] = 0 \quad 或 \quad \hat{P}_2 f_m^k(-\alpha) = f_m^k(-\alpha)\hat{P}_2$$

由此得到$|\Lambda k(m)M\rangle$对 $\hat{P}_2$ 的本征值为

$$\hat{P}_2|\Lambda, k(m)M\rangle = \hat{P}_2 f_m^k(-\alpha)|\Lambda\rangle = f_m^k(-\alpha)\hat{P}_2|\Lambda\rangle$$
$$= (\Lambda+2g, \Lambda)f_m^k(-\alpha)|\Lambda\rangle$$
$$= (\Lambda+2g, \Lambda)|\Lambda, k(m)M\rangle \qquad (10.5.16)$$

这一点是十分重要的，它说明对于以最高权 Λ 标记的不可约表示，它的全部基矢对 Casimir 算子 $\hat{P}_2$ 有共同的本征值$(\Lambda+2g, \Lambda)$. 或者说，不可约表示 Λ 的表示空间 V_Λ 中任一向量都是 $\hat{P}_2$ 的本征向量，本征值为$(\Lambda+2g, \Lambda)$.

显然对(10.5.9)式定义的广义高阶 Casimir 算子也具有相同的属性，即 Lie 代数的所有元素都是 i 阶($2\leqslant i\leqslant r$)Casimir 算子 $\hat{P}_2$ 的本征矢量，而且有共同的本征值.

10.5.3　二阶 Casimir 算子本征值的计算

二阶 Casimir 算子的本征值$(\Lambda+2g, \Lambda)$对每种典型 Lie 代数都可统一地计算，给出明确表达式.

在第 9.7 节中，我们用 n 维空间的单位正交矢量 $e_i=(0, 0, \cdots, 0, 1, 0, \cdots, 0)$(第 i 个分量上为 1，其它分量都为 0)，描述了典型 Lie 代数 A_{n-1}，B_n，C_n 和 D_n 的根矢量和素根. 为了使用度规张量 $g_{ij}=\delta_{ij}$(g_{ij}为度规张量中 Cartan 子代数的部分)，典型 Lie 代数的根向量需要进行了归一化，9.7 节已给出了归一化常数为

$$A_n:[2(n+1)]^{-\frac{1}{2}},\ B_n:[2(2n-1)]^{-\frac{1}{2}}$$
$$C_n:[2(2n+2)]^{-\frac{1}{2}},\ D_n:[2(2n-2)]^{-\frac{1}{2}}$$

记它们为 C_g.

现在讨论 Casimir 算子的本征值也把最高权按这组基矢展开，把正根和 g 也按这组基展开，即令

$$\boldsymbol{\Lambda} = \sum_{i=1}^{[n]} x_i \boldsymbol{e}_i \quad (对 A_n[n] = n+1, 对 B_n, C_n, D_n, [n] = n) \tag{10.5.17}$$

因为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 为 n 维矢量(n 为 Lie 代数的秩)，对于 A_n，基矢有 $n+1$ 个，因而这种展开是不唯一的，为此限定 $\sum_{i=1}^{n+1} x_i = 0$. 这样，展开式(10.5.17)就完全确定了.

同样，矢量 g(正根之和的一半)也对$\{\boldsymbol{e}_i, i=1, 2, \cdots, [n]\}$展开为

$$g = \sum_{i=1}^{[n]} g_i \boldsymbol{e}_i \tag{10.5.18}$$

于是 $\hat{P}_2$ 的本征值为

$$(\boldsymbol{\Lambda} + 2g, \boldsymbol{\Lambda}) = C_g \sum_i \sum_j (x_i + 2g_i) x_j (\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) \tag{10.5.19}$$

对于归一化基矢$\{\boldsymbol{e}_i\}$，内积

$$(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) = \delta_{ij} \tag{10.5.20}$$

C_g 为典型 Lie 代数 g 的归一化常数，对典型 Lie 代数 A_n, B_n, C_n, D_n 前面已给出了归一化因子 C_g. 因而

$$(\boldsymbol{\Lambda} + 2g, \boldsymbol{\Lambda}) = C_g \sum_i (x_i + 2g_i) x_i \tag{10.5.21}$$

下面只须对一定 Lie 代数求出 g_i，对一定最高权求出 x_i，由(10.5.21)式就具体计算出了本征值.

1. Lie 代数 A_n 的 Casimir 算子本征值

9.7 节已给出了 Lie 代数 A_n 的根系为

$$\Sigma: \{\boldsymbol{e}_i - \boldsymbol{e}_j,\ i, j = 1, 2, \cdots, n+1\}$$

$i<j$ 的根为正根，因而

$$g = \frac{1}{2}\sum_{i<j}(\boldsymbol{e}_i - \boldsymbol{e}_j) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n+1}(n-2i+2)\boldsymbol{e}_i \tag{10.5.22}$$

对一定的最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$，为求出(10.5.17)式中的展开系数，计算$\dfrac{2(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\alpha}_i)}{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)}$，即

$$\lambda_j = \frac{2(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\alpha}_j)}{(\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\alpha}_j)} = 2\sum_{i=1}^{n+1} x_i \frac{(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{\alpha}_j)}{(\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\alpha}_j)} \tag{10.5.23}$$

$\boldsymbol{\alpha}_j \in \Pi$ 为素根，A_n 的素根为 $\boldsymbol{\alpha}_j = \boldsymbol{e}_j - \boldsymbol{e}_{j+1}$, $j=1, 2, \cdots, n$，因而$(\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\alpha}_j) = (\boldsymbol{e}_j - \boldsymbol{e}_{j+1}, \boldsymbol{e}_j - \boldsymbol{e}_{j+1}) = 2$,

$$(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{\alpha}_j) = (\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j - \boldsymbol{e}_{j+1}) = \begin{cases} 1, & i=1 \\ -1, & i=j+1 \\ 0, & 其它 \end{cases} \tag{10.5.24}$$

由此得到

$$\lambda_i = \frac{2(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\alpha}_i)}{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)} = x_i - x_{i+1}, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{10.5.25}$$

由(10.5.20)式可得到

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = x_{n+1}, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{10.5.26}$$

容易得到

$$\sum_{i=k}^{n} i\lambda_i = \sum_{j=1}^{n+1} x_j - (n+1)x_{n+1} = N$$

对最高权 λ_i 为非负整数，因而 $\sum_{i=1}^{n} i\lambda_i = N$ 为由最高权决定的正整数，而对 Lie 代数 A_n，$\sum_{i=1}^{n+1} x_i = 0$，因而

$$x_{n+1} = -\frac{N}{n+1}$$

于是(10.5.26)式的 x_k 为

$$\begin{cases} x_k = \sum_{i=k}^{n} \lambda_i - \dfrac{N}{n+1}, \quad k = 1, 2, \cdots, n \\ x_{n+1} = -\dfrac{N}{n+1} \end{cases} \tag{10.5.27}$$

把用最高权$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$和 $\sum_i i\lambda_i = N$ 表示的 $x_i(i=1, 2, \cdots, n+1)$的(10.5.27)式代入(10.5.19)式就可计算出 Lie 代数 A_n(或 $su(n+1)$ 以$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$标记的不可约表示的 Casimir 算子 $\hat{P}_2$ 的本征值.

$$C_{A_n}(\boldsymbol{\Lambda}) = (\boldsymbol{\Lambda} + 2g, \boldsymbol{\Lambda}) = \frac{1}{2(n+1)} \sum_{i}^{n+1} (x_i + n + 2 - 2i)x_i \tag{10.5.28}$$

2. Lie 代数 B_n 的 Casimir 算子的本征值

9.7 节已给出 Lie 代数 B_n 的根系为

$$\Sigma = \{ \pm \boldsymbol{e}_i, i=1, 2, \cdots, n; \pm(\boldsymbol{e}_i \pm \boldsymbol{e}_j), i<j, i,j=1, 2, \cdots, n\}$$

正根为

$$\Sigma^+ = \{\boldsymbol{e}_i, i=1, 2, \cdots, n; \boldsymbol{e}_i \pm \boldsymbol{e}_j, i<j=1, 2, \cdots, n\}$$

因而

$$\begin{aligned} g &= \frac{1}{2}\sum_{\alpha\in\Sigma^+} \boldsymbol{\alpha} = \frac{1}{2}\Big[\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{e}_i + \sum_{i<j} (\boldsymbol{e}_i + \boldsymbol{e}_j) + \sum_{i<j} (\boldsymbol{e}_i - \boldsymbol{e}_j)\Big] \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} (2n+1-2i)\boldsymbol{e}_i = \sum_{i=1}^{n} g_i \boldsymbol{e}_i, \quad g_i = n + \frac{1}{2} - i \end{aligned} \tag{10.5.29}$$

最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的展开式为

$$\boldsymbol{\Lambda} = \sum_{i=1}^{n} x_i \boldsymbol{e}_i \tag{10.5.30}$$

由此得到

$$\lambda_j = \frac{2(\Lambda, \alpha_j)}{(\alpha_j, \alpha_j)} = \sum_{i=1}^{n} x_i \frac{2(e_i, \alpha_j)}{(\alpha_j, \alpha_j)}$$

Lie 代数 B_n 的素根系(Π 系)为$\{\alpha_i = e_i - e_j,\ i=1, 2, \cdots, n-1,\ \alpha_n = e_n\}$，因而

$$(\alpha_i, \alpha_i) = \begin{cases} 2, & i=1, 2, \cdots, n-1 \\ 1, & i=n \end{cases}$$

于是得到

$$\begin{cases} \lambda_j = \sum_{i=1}^{n} x_i(e_i, e_j) = x_j - x_{j+1}, \quad j = 1, 2, \cdots, n-1 \\ \lambda_n = 2\sum_{i=1}^{n} x_i(e_i, \alpha_n) = 2x_n \end{cases} \tag{10.5.31}$$

由此得到

$$\begin{cases} x_i = \sum_{k=i}^{n-1} \lambda_k + \frac{1}{2}\lambda_n,\ i = 1, 2, \cdots, n-1 \\ x_n = \frac{1}{2}\lambda_n \end{cases} \tag{10.5.32}$$

把(10.5.29)式和(10.5.32)式代入(10.5.19)式得到 Casimir 算子本征值为

$$C_{B_n}(\Lambda) = \frac{1}{2(2n-1)}\sum_i (x_i + 2n + 1 - 2i)x_i \tag{10.5.33}$$

3. Lie 代数 C_n 的 Casimir 算子本征值

Lie 代数 C_n 的根系 Σ 和素根系 Π 为

$$\Sigma: \{2e_i,\ i=1, 2, \cdots, n,\ \pm(e_i \pm e_j),\ i<j=1, 2, \cdots, n\}$$

$$\Pi: \{e_i - e_{i+1},\ i=1, 2, \cdots, n-1,\ 2e_n\}$$

通过与前面相同的计算可得到

$$\begin{cases} g_i = n + 1 - i \\ x_i = \sum_{k=i}^{n} \lambda_i \end{cases} \tag{10.5.34}$$

由此得到

$$C_{C_n}(\Lambda) = \frac{1}{2(2n+2)}\sum_{i=1}^{n} x_i(x_i + 2n + 2 - 2i)x_i \tag{10.5.35}$$

4. Lie 代数 D_n 的 Casimir 算子的本征值

D_n 的根系和素根系为

$$\Sigma: \{\pm e_i \pm e_j,\ 1 \leqslant i < j \leqslant n\}$$

$$\Pi: \{e_i - e_{i+1},\ i=1, 2, \cdots, n-1,\ 1 \leqslant i < j \leqslant n,\ e_{n-1} + e_n\}$$

通过与前面同样的计算可得到

$$g_i = n - i$$

$$x_i = \frac{\lambda_{n-1} + \lambda_n}{2} + \sum_{k=i}^{n-2} \lambda_i \tag{10.5.36}$$

Casimir 算子本征值为

$$C_{D_n}(\Lambda) = \frac{1}{4(n-1)}\sum_i x_i(x_i + 2n - 2i) \tag{10.5.37}$$

10.5.4 Lie 代数 $A_2(su(3))$ 的 Casimir 算子及其本征值

作为例子讨论一下 Lie 代数 $A_2(su(3))$ Casimir 算子及其本征值. Lie 代数 A_2 根空间是二维的，共有 6 个非零根 $\pm\boldsymbol{\alpha}$, $\pm\boldsymbol{\beta}$, $\pm(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})$，在归一化 $\sum_{\alpha}\boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{\alpha}_j = \delta_{ij}$ 条件下它们为

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(1, \sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\beta} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(1, -\sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(1, 0)$$

利用这组根，C-W 基的代数结构为

$$[H_i, E_\alpha] = \boldsymbol{\alpha}_i E_\alpha, \quad [E_\alpha, \quad E_\beta] = N_{\alpha+\beta}E_{\alpha+\beta}, \quad [E_\alpha, E_{-\alpha}] = \boldsymbol{\alpha}_i H_i$$

其中 $N_{\alpha\beta}$ 对 A_2 为 $N_{\alpha,\beta} = -N_{\alpha,(\alpha+\beta)} = \frac{1}{\sqrt{6}}$，具体写出结构常数，可计算出度规张量为

$$g = \begin{pmatrix} 1 &&&&&&& \\ & 1 &&&&&& \\ && 0 & 1 &&&& \\ && 1 & 0 &&&& \\ &&&& 0 & 1 && \\ &&&& 1 & 0 && \\ &&&&&& 0 & 1 \\ &&&&&& 1 & 0 \end{pmatrix} = g^{-1}$$

因而 Casimir 算子 $\hat{P}_{A_2}$ 为

$$\begin{aligned}\hat{P}_{A_2} &= H_1^2 + H_2^2 + E_\alpha E_{-\alpha} + E_{-\alpha}E_\alpha \\ &\quad + E_\beta E_{-\beta} + E_{-\beta}E_\beta + E_{\alpha+\beta}E_{-(\alpha+\beta)} + E_{-(\alpha+\beta)}E_{\alpha+\beta}\end{aligned}$$

取最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 标记的不可约表示中对应于 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的基矢为 $|\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\Lambda}\rangle$，$\hat{P}_{A_2}$ 作用于这个基矢为

$$\begin{aligned}&\hat{P}_{A_2}|\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\Lambda}\rangle \\ &= (\Lambda_1^2 + \Lambda_2^2)|\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\Lambda}\rangle + \{[E_\alpha E_{-\alpha}] + [E_\beta E_{-\beta}] + [E_{\alpha+\beta}, E_{-(\alpha+\beta)}]\}|\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\Lambda}\rangle \\ &= [\Lambda_1^2 + \Lambda_2^2 + (\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}, \Lambda)]|\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\Lambda}\rangle \\ &= (\boldsymbol{\Lambda} + 2g, \boldsymbol{\Lambda})|\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\Lambda}\rangle\end{aligned}$$

在 10.3 节的例子中已给出了 Lie 代数 A_2 的最大权为

$$\boldsymbol{\Lambda} = \frac{2\lambda_1 + \lambda_2}{3}\boldsymbol{\alpha} + \frac{\lambda_1 + 2\lambda_2}{3}\boldsymbol{\beta}$$

$$\lambda_1 = \frac{2(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})}, \quad \lambda_2 = \frac{2(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta})}$$

$\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ 为素根，于是

$$\begin{aligned}&(\boldsymbol{\Lambda} + 2g, \boldsymbol{\Lambda}) \\ &= \left(\frac{2\lambda_1 + \lambda_2}{3}\boldsymbol{\alpha} + \frac{\lambda_1 + 2\lambda_2}{3}\boldsymbol{\beta} + 2\boldsymbol{\alpha} + 2\boldsymbol{\beta}, \frac{2\lambda_1 + \lambda_2}{3}\boldsymbol{\alpha} + \frac{\lambda_1 + 2\lambda_2}{3}\boldsymbol{\beta}\right)\end{aligned}$$

$$=\frac{2\lambda_1+\lambda_2+6}{3}\frac{2\lambda_1+\lambda_2}{3}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})$$

$$+\left(\frac{\lambda_1+2\lambda_2+6}{3},\frac{2\lambda_1+\lambda_2}{3}+\frac{2\lambda_1+\lambda_2+6}{3},\frac{\lambda_1+\lambda_2}{3}\right)(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$$

$$+\frac{\lambda_1+2\lambda_2+6}{3}\frac{\lambda_1+2\lambda_2}{3}(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})$$

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})=\frac{1}{3},\ (\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})=\frac{1}{3},\ (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=-\frac{1}{6}$$

于是

$$(\boldsymbol{\Lambda}+2g,\boldsymbol{\Lambda})=\frac{1}{9}(\lambda_1^2+\lambda_2^2+\lambda_1\lambda_2+3\lambda_1+3\lambda_2)$$

由公式(10.5.27)可得到

$$x_1=\frac{2\lambda_1+\lambda_2}{3},\ x_2=-\frac{1}{3}(\lambda_1-\lambda_2),\ x_3=-\frac{1}{3}(\lambda_1+2\lambda_2)$$

代入(10.5.28)式得到

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\Lambda}+2g,\boldsymbol{\Lambda})&=\frac{1}{6}[x_1(x_1+2)+x_2x_2+x_3(x_3-2)]\\&=\frac{1}{9,6}[(2\lambda_1-\lambda_2)(2\lambda_1+\lambda_2+6)\\&\quad-(\lambda_1-\lambda_2)^2+(x_1+2\lambda_2)(x_1+2\lambda_2+6)]\\&=\frac{1}{9}(\lambda_1^2+\lambda_2^2+\lambda_1\lambda_2+3\lambda_1+3\lambda_2)\end{aligned}$$

这两个结果是完全一致的.

如果取 A_2 的根为 $\boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{e}_1-\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{e}_2-\boldsymbol{e}_3$, $\boldsymbol{\alpha}_3=\boldsymbol{e}_1-\boldsymbol{e}_3=\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2$, 由此得到的结构常数与前面的归一化根的结构常数是不一样的, 因而用这种结构常数得到的度规张量也有不同的形式, 从而 Casimir 算子也不同, 这种差异就是归一化常数$\left[\frac{1}{2(n+1)}\right]^{1/2}$. 因而对于这种形式的根, 在本征值方程中要乘以$\frac{1}{2(n+1)}$.

第十一章　Lie 代数 $su(2)$，$so(3)$ 和 Lie 群 $SU(2)$，$SO(3)$ 的不可约表示

本章首先讨论三参数单 Lie 代数的实形，由此得到紧致和非紧致三参数 Lie 群，然后详细讨论 $SU(2)$ 和 $SO(3)$ 群的有限维不可约酉表示，在此基础上研究不可约表示的直积分解和 C-G 系数，以及 Racah 系数，而后讨论了不可约张量算子和 W-E 定理.

11.1　Lie 代数 A_1 的实形

11.1.1　Lie 代数 A_1 的实形

典型 Lie 代数 $A_1 \sim B_1 \sim C_1$ 是唯一的一个三参数复单 Lie 代数. 它的根空间是一维的，只有两个一维的根 α，$-\alpha$，取 $\alpha = 1$. 于是 C-W 基为 $\{H, E_{+1}, E_{-1}\}$ Lie 代数为

$$[H, E_{\pm 1}] = \pm E_{\pm 1}, \quad [E_{+1}, E_{-1}] = H \tag{11.1.1}$$

这个 Lie 代数与 9.2 节中(9.2.39)式给出的 $SO(3)$ 群的的无穷小算子 $\{L_x, L_y, L_z\}$ 是很有关系的，可以令

$$H = L_0 = L_z, \quad E_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(L_x \pm \mathrm{i}L_y) = L_{\pm 1}$$

这说明复 Lie 代数 A_1 与 $\{L_0, L_{\pm 1}\}$ 构成的实 Lie 代数同构，而 $SO(3)$ 群的无穷小算子 $\{L_x, L_y, L_z\}$ 构成实 Lie 代数 $so(3)$，它们的 Lie 代数为

$$[L_x, L_y] = \mathrm{i}L_z, \quad [L_y, L_z] = \mathrm{i}L_x, \quad [L_z, L_x] = \mathrm{i}L_y \tag{11.1.2}$$

由于 L_x，L_y，L_z 与 H，$E_{\pm}$ 存在同构关系，因而复 Lie 代数 A_1 为实 Lie 代数 $so(3)$ 的复扩充，也就是说 $so(3)$ 为 A_1 的一个实形.

9.2 节也给出了 $SU(2)$ 群的无穷小生成元，即

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

如果令

$$L_0 = \frac{1}{2}\sigma_3, \quad L_{\pm 1} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(\sigma_1 \pm \mathrm{i}\sigma_2) \tag{11.1.3}$$

则它们的 Lie 代数也是 $\{L_0, L_{\pm 1}\}$ Lie 代数，因而 Lie 代数 $su(2)$ 与 $so(3)$ 同构，它们都是复 Lie 代数 A_1 的实形.

根据定理 9.9.3，Lie 代数 A_1 的实形基矢应当取 $\mathrm{i}L_z$，$\mathrm{i}L_y$，$\mathrm{i}L_z$，因而 A_1 的实形实 Lie 代数 $so(3)$ 的基矢为 $\{\mathrm{i}L_z, \mathrm{i}L_x, \mathrm{i}L_y\}$，$so(3)$ 的 Lie 代数为

$$[\mathrm{i}L_x, \mathrm{i}L_y] = -\mathrm{i}L_z, \quad [\mathrm{i}L_y, \mathrm{i}L_z] = -\mathrm{i}L_x, \quad [\mathrm{i}L_z, \mathrm{i}L_x] = -\mathrm{i}L_y$$

结构常数为 $C^z_{xy}=C^x_{yz}=C^y_{zx}=-1$，因此得到 Cartan-Killing 度规张量为

$$g=\begin{pmatrix}-2 & 0 & 0\\ 0 & -2 & 0\\ 0 & 0 & -2\end{pmatrix}$$

即 $so(3)$的度规张量是负定的，根据定理9.9.1，它是紧致 Lie 代数，这便进一步证明了 $so(3)\sim su(2)$是 A_1 的紧致实形.

如果令

$$L'_x=-\mathrm{i}L_x,\quad L'_y=-\mathrm{i}L_y,\quad L'_z=L_z$$

则得到 Lie 代数

$$[L'_x, L'_y]=-L'_z,\quad [L'_y, L'_z]=-L'_x,\quad [L'_z, L'_x]=-L'_y \tag{11.1.3'}$$

它的复扩充也是 Lie 代数 A_1，因而由$\{L'_x, L'_y, L'_z\}$构成的 Lie 代数记为 $so(2,1)$，它的复扩充也是 Lie 代数 A_1，同样 $so(2,1)$为 A_1 的另一个实形. 由(11.1.3′)式得到它的度规张量为

$$g=\begin{pmatrix}-2 & 0 & 0\\ 0 & -2 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{pmatrix},\quad \det g=8$$

因而 $so(2,1)$是 A_1 的非紧致实形，$so(2,1)$与 Lie 代数 $su(1,1)$同构. 相应的 Lie 群为 $SO(2,1)$和 $SU(1,1)$.

把这两种情况归纳在一起，(11.1.1)式可写为

$$[L_0, L_{\pm1}]=\pm L_{\pm1},\quad [L_{+1}, L_{-1}]=qL_0 \tag{11.1.4}$$

当 $q=1$ 时，为实 Lie 代数 $su(2)\sim so(3)$，当 $q=-1$ 时，为 $so(2,1)\sim su(1,1)$. 由(11.1.4)式得到度规张量为

$$g=\begin{pmatrix}2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 2q\\ 0 & 2q & 0\end{pmatrix},\quad \det g=-8q$$

g 的逆为

$$g^{-1}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{2q}\\ 0 & \frac{1}{2q} & 0\end{pmatrix}$$

定义 Casimir 算子为

$$\begin{aligned}\hat{C}&=2g^{\sigma\lambda}X_\sigma X_\lambda=L_0^2+\frac{2}{q}(L_{+1}L_{-1}+L_{-1}L_{+1})\\ &=\begin{cases}L_x^2+L_y^2+L_z^2=L^2, & q=1,\ so(3)\sim su(2)\\ -L^{2\prime}_x-L^{2\prime}_y+L^{2\prime}_z, & q=-1,\ so(3,1)\sim su(1,1)\end{cases}\end{aligned} \tag{11.1.5}$$

Casimir 算子的定义(11.1.5)式与第十章的定义差2倍，这是为了使 $\hat{C}=\hat{L}^2$，物理意

义更加明显. 这两个定义对讨论任何问题都没有影响. 由(11.1.5)式看到 $so(3)$ 的 Casimir算子就是轨道角动量平方，即$\hat{L}^2$，$su(2)$的 Casimir 算子就是自旋角动量算子的平方，通常记为 $\hat{S}^2$. $\hat{L}_x$，$\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$ 或 $\hat{S}_x$，$\hat{S}_y$，$\hat{S}_z$ 就是轨道或自旋角动量算子，因而它们都是 Hermitian 算子.

为了不限于描述 $SO(3)$群的轨道角动量，同时也描述 $SU(2)$群的自旋角动量，以后把 L_x，L_y，L_z 和 L^2 以及 $\hat{S}_x$，$\hat{S}_y$，$\hat{S}_z$ 和 $\hat{S}^2$ 均写为 J_x，J_y，J_z 和 J^2.

Lie 代数 A_1 的实形除了上面讨论的两种外，还可以使(11.1.4)式中 $q=0$，即

$$[J_{+1}, J_{-1}]=0,\ [J_0, J_{\pm1}]=\pm J_{\pm1} \tag{11.1.6}$$

这个 Lie 代数为二维空间的 Euclide 代数 E_2，它可表示为二维平移代数 T_2 和二维旋转群的 Lie 代数 $so(2)$的半直和，即

$$E=T_2\oplus_s so(2)$$

11.1.2　非紧致 Lie 代数 $su(1,1)$和 $so(2,1)$

为了说明非紧致 Lie 代数 $su(1,1)$，$so(2,1)$，下面简要说明一下非紧致 Lie 群 $SU(m,p)$和 $SO(m,p)$.

对于 n 维复空间定义一组基矢 $\boldsymbol{e}_i$，$i=1,2,\cdots,n$，空间中任一向量 X 都可表示为

$$X=x_i\boldsymbol{e}_i$$

定义向量内积(inner product)为

$$(X,Y)=\sum_{ij}x_i^*g_{ij}y_j$$

其中

$$g_{ij}=(\boldsymbol{e}_i,\boldsymbol{e}_j)$$

以 g_{ij}为矩阵元的矩阵 g 称为度规张量，如果

$$g_{ij}=\delta_{ij}g_{ii}$$

称为正交基矢，于是

$$(X,Y)=\sum_i x_i^*g_{ii}y_i$$

称

$$(X,X)=\sum_i x_i^*g_{ii}x_i$$

为二次形. 如果 $g_{ij}=\delta_{ij}$，称为厄米空间(Hermitian Spaces)或酉空间. 保持酉空间二次形不变的矩阵为酉矩阵，这种矩阵构成的群为酉群，$U(n)$. 由单模酉矩阵构成的 $U(n)$的子群为单模酉群 $SU(n)$.

对于 n 维实空间 $g_{ij}=\delta_{ij}$，称为 Euclide 空间. 保持这种空间二次形不变的矩阵为正交矩阵，它们的群为 $O(n)$群，其单模子群为 $SO(n)$.

如果度规张量

$$g_{ij}=\begin{cases}\delta_{ij}, & i=1,2,\cdots,m\\ -\delta_{ij}, & i=m+1,m+2,\cdots,m+p=n,\quad n=m+p\end{cases} \tag{11.1.7}$$

二次形为

$$(X, X) = \sum_{i=1}^{m} x_i^* x_i - \sum_{i=m+1}^{m+p} x_i^* x_i$$

这种空间称赝酉空间(pseudo-unitary spaces). 保持 $n = m + p$ 的赝酉空间二次形不变的矩阵称赝酉矩阵. 全部保持赝酉空间二次形不变的赝酉矩阵构成的群为 $U(m, p)$, 它的单模子群为 $SU(m, p)$ 群.

由保持赝酉空间二次形不变, 即

$$(AX, AX) = (X, X)$$

可推导出 $n = m + p$ 维赝酉矩阵 A 具有性质

$$g^{-1}A^+g = A^{-1} \tag{11.1.8}$$

其中 g 为赝酉空间的度规张量. 显然赝酉矩阵之积还是赝酉矩阵, 因为若 A, B 是赝酉矩阵, 即

$$\begin{aligned}(AB)^{-1} &= B^{-1}A^{-1} = g^{-1}B^+gg^{-1}A^+g \\ &= g^{-1}B^+A^+g = g^{-1}(AB)^+g\end{aligned}$$

因而 $AB = C$ 也是赝酉矩阵, 它们构成一个群, 即 $U(m, p)$ 群, 单模子群为 $SU(m, p)$.

$n = m + p$ 维实空间, 若度规张量具有(11.1.7)式的形式, 则称为赝 Euclidean 空间. 保持赝 Euclidean 空间二次形不变的矩阵为赝正交矩阵, 它们构成的群为 $O(m, p)$, 单模子群为 $SO(m, p)$. 赝正交矩阵具有性质

$$g^{-1}\tilde{A}g = A^{-1} \tag{11.1.9}$$

由(11.1.8)式得到赝酉矩阵, 矩阵元的条件为

$$\sum_l a_{il}g_{ll}a_{jl}^*g_{jj} = \delta_{ij}, \quad \sum_l g_{ii}a_{li}^*a_{lj}g_{ll} = \delta_{ij} \tag{11.1.10}$$

由(11.1.5)式可得到赝正交矩阵矩阵元的类似条件.

由度规张量的定义可以看到, 在 $n = m + p$ 维赝酉空间或赝正交空间中, m 个坐标是实的, p 个坐标是虚数. 因而, $SU(m, p)$ 和 $SO(m, p)$ 群所作用的 n 维空间除 m 个实坐标外, 还有 p 个虚数坐标.

$SU(1, 1)$ 群的矩阵是 2×2 单模矩阵, 形如

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad ad - bc = 1$$

它的逆矩阵为

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$

由条件

$$\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^+\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^* & -c^* \\ -b^* & d^* \end{pmatrix}$$

得到

$$d = a^*, \ b = c^*, \quad cd - bc = a^*a - c^*c = 1$$

因而 $SU(1, 1)$ 群的元素为

$$\begin{pmatrix} a & c^* \\ c & a^* \end{pmatrix}, \quad aa^* - cc^* = 1$$

只有三个实参数，条件 $aa^* - cc^* = 1$，并不要求 aa^* 和 cc^* 有界，因而它是非紧致的.

而(9.2.21)式已给出 $SU(2)$ 群的矩阵为

$$\begin{pmatrix} a & c \\ -c^* & a^* \end{pmatrix}, \quad aa^* + cc^* = 1$$

因而是紧致的.

同样 $SO(3, 1)$ 的群元素具有性质

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tilde{A} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

由此得到矩阵 A

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

的逆矩阵为

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & -a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ -a_{13} & -a_{23} & a_{33} \end{pmatrix}$$

由此得到

$$a_{11}^2 + a_{12}^2 - a_{13}^2 = 1, \quad a_{21}^2 + a_{22}^2 - a_{23}^2 = 1, \quad -a_{31}^2 + a_{32}^2 + a_{33}^2 = 1, \cdots$$

因而 $SO(2, 1)$ 群也是非紧致的. 群 $SO(2, 1)$ 可表示为

$$SO(2, 1) = \{A \in SO(3, \mathbf{C}) \mid a_{13}, a_{23}, a_{31}, a_{32}\text{取虚数，其余为实数}\}$$

11.2 Lie 群 $SU(2)$ 和 $SO(3)$

11.2.1 Lie 群 $SU(2)$ 及其定义域与连通性

把 $SU(2)$ 群的无穷小生成元记为 $\sigma_1 = \sigma_x$, $\sigma_2 = \sigma_y$, $\sigma_3 = \sigma_z$, 并令

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \boldsymbol{i}_{x+} + \sigma_y \boldsymbol{i}_{y+} + \sigma_z \boldsymbol{i}_z$$

于是 Lie 代数 $su(2)$ 中任意元素 $\boldsymbol{X} = x\boldsymbol{i}_x + y\boldsymbol{i}_y + z\boldsymbol{i}_z$ 为

$$r\boldsymbol{\sigma} = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z = \begin{pmatrix} z & x - \mathrm{i}y \\ x + \mathrm{i}y & -z \end{pmatrix}, \quad \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = r \qquad (11.2.1)$$

单位元邻域内群 $SU(2)$ 的元素为

$$M(\delta \boldsymbol{x}) = \delta \boldsymbol{x} \boldsymbol{\sigma} = \delta_x \sigma_x + \delta_y \sigma_y + \delta_z \sigma_z$$

因而有限参数的群元素为

$$\lim_{N \to \infty} \left(E - \mathrm{i} \frac{1}{n} r\boldsymbol{\sigma} \right)^n = \exp(-\mathrm{i} r\boldsymbol{\sigma})$$

利用矩阵指数函数的级数展开公式可得到

$$\exp(-\mathrm{i}r\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-\mathrm{i}r\boldsymbol{\sigma})^n$$

由于

$$(r\boldsymbol{\sigma})^n = \begin{pmatrix} z & x-\mathrm{i}y \\ x+\mathrm{i}y & -z \end{pmatrix}^{2n} = r^{2n}$$

$$(r\boldsymbol{\sigma})^{2n+1} = r^{2n+1}\begin{pmatrix} \frac{z}{r} & \frac{x}{r}-\mathrm{i}\frac{y}{r} \\ \frac{x}{r}+\mathrm{i}\frac{y}{r} & -\frac{z}{r} \end{pmatrix} \tag{11.2.2}$$

可得到

$$\exp(-\mathrm{i}r\boldsymbol{\sigma}) = \begin{pmatrix} \cos r+\mathrm{i}\frac{z}{r}\sin r & \mathrm{i}\frac{x}{r}\sin r+\frac{y}{r}\sin r \\ \mathrm{i}\frac{x}{r}\sin r-\frac{y}{r}\sin r & \cos r-\mathrm{i}\frac{z}{r}\sin r \end{pmatrix} \tag{11.2.3}$$

由于$(-\mathrm{i}r\boldsymbol{\sigma})^+ = \mathrm{i}r\boldsymbol{\sigma}$是反 Hemitian 矩阵，因而$\exp(-\mathrm{i}r\boldsymbol{\sigma})$为单模酉矩阵.

取向量$\boldsymbol{r}$的单位向量为$\boldsymbol{n}$，于是$\boldsymbol{r}=r\boldsymbol{n}$，$(n_x^2+n_y^2+n_z^2)=1$. n_x，n_y，n_z为$\boldsymbol{r}$的方向余弦). 取$\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$，则(11.2.3)式变为

$$U(\boldsymbol{n}, r) = \exp(-\mathrm{i}r\boldsymbol{nJ}) = \begin{pmatrix} \cos\frac{r}{2}+\mathrm{i}n_z\sin\frac{r}{2} & -\mathrm{i}n_x\sin\frac{r}{2}+n_y\sin\frac{r}{2} \\ -\mathrm{i}n_x\sin\frac{r}{2}-n_y\sin\frac{r}{2} & \cos\frac{r}{2}-\mathrm{i}n_z\sin\frac{r}{2} \end{pmatrix} \tag{11.2.3'}$$

由此可看到

$$\exp(-\mathrm{i}r\boldsymbol{nJ}) = \exp(-\mathrm{i}(r+4\pi)\boldsymbol{nJ}) = -\exp(-\mathrm{i}(r+2\pi)\boldsymbol{nJ}) \tag{11.2.4}$$

这表明可用3个独立参数n_x，n_y($n_z=\sqrt{1-n_x^2-n_y^2}$)和r描述$SU(2)$群的矩阵. n_x，n_y是方向余弦，它们的变化范围为$-\pi\leqslant n_x\leqslant\pi$，$-\pi\leqslant n_y\leqslant\pi$，由(11.2.4)式看到参数$r$是以$4\pi$为周期变化的，当$r'=r+2\pi$时，矩阵变为参数为$r$的负矩阵.

由此得到$SU(2)$群三个参数的定义域为$\mathbf{R}^3$空间半径为2π的球，球面上的全部点$(2\pi\boldsymbol{n})$对应于元素$-E=\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$，而球内每一点对应一个元素$U(r, n_x, n_y)$，即球面上的点都是等价的.

在半径为2π的球上，任意一点都可经过参数(n_x, n_y, n_z)的连续变而变到坐标原点(球心)，因而$SU(2)$群是连通群. 球的任一直径的两个端点是等价点，因而r在$\boldsymbol{n}$决定的一个直径上由经过π变到2π时，球心点a变到直径端点b，再经过3π，变到4π. 与b点等价的直径另一端的端点b'沿同一直径变到球心点a. 这表明$SU(2)$群是单连通的.

11.2.2 $SO(3)$群及其定义域与连通性

取(9.2.19)式给出的$SO(3)$群的三个无穷小生成元构造$SO(3)$群. 并令$\mathrm{i}I_1=L_x$，$\mathrm{i}I_2$

$=L_y$, $iI_3=L_z$, $\boldsymbol{I}=\boldsymbol{i}_xL_x+\boldsymbol{i}_yL_y+\boldsymbol{i}_zL_z$, $\boldsymbol{i}_x$, $\boldsymbol{i}_y$, $\boldsymbol{i}_z$ 分别为 x, y, z 方向的单位向量.

$$\boldsymbol{\varphi}=\boldsymbol{n}\varphi$$

$\boldsymbol{n}=(n_x, n_y, n_z)$ 为向量 $\boldsymbol{\varphi}$ 的单位向量, $n_x^2+n_y^2+n_z^2=1$, n_x, n_y, n_z 为方向余弦. 于是由 L_x, L_y, L_z 构成的 Lie 代数 $o(3)$ 的元素可写为

$$X=\mathrm{i}\varphi\boldsymbol{nL}=\begin{pmatrix}0 & -\varphi n_z & \varphi n_y\\ \varphi n_z & 0 & -\varphi n_x\\ -\varphi n_y & \varphi n_x & 0\end{pmatrix}\tag{11.2.5}$$

显然它是迹零的反对称矩阵, 因而通过指数映射得到 $SO(3)$ 群.

经过指数映射后群元素为

$$R(n_x, n_y, n_z, \varphi)=\exp(-\mathrm{i}\varphi\boldsymbol{nL})\tag{11.2.6}$$

利用公式

$$(-\mathrm{i}\boldsymbol{nL})^{2m+1}=(-1)^m\begin{pmatrix}0 & -n_z & n_y\\ n_z & 0 & n_x\\ -n_y & n_x & 0\end{pmatrix}$$

$$(-\mathrm{i}\boldsymbol{nL})^{2m}=(-1)^m\begin{pmatrix}1-n_x^2 & -n_xn_y & -n_xn_z\\ -n_xn_y & 1-n_y^2 & -n_yn_z\\ -n_xn_z & -n_yn_z & 1-n_z^2\end{pmatrix}\tag{11.2.7}$$

(11.2.6)式指数展开后可得到

$$\begin{aligned}&R(n_x, n_y, n_z, \varphi)=\exp(-\mathrm{i}\varphi\boldsymbol{nL})\\ &=\begin{pmatrix}n_x^2(1-\cos\varphi)+\cos\varphi & n_xn_y(1-\cos\varphi)-n_z\sin\varphi & n_xn_z(1-\cos\varphi)+n_y\sin\varphi\\ n_xn_y(1-\cos\varphi)+n_z\sin\varphi & n_y^2(1-\cos\varphi)+\cos\varphi & n_yn_z(1-\cos\varphi)-n_x\sin\varphi\\ n_xn_z(1-\cos\varphi)-n_y\sin\varphi & n_yn_z(1-\cos\varphi)+n_x\sin\varphi & n_z^2(1-\cos\varphi)+\cos\varphi\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{11.2.8}$$

其中 φ 为转动角度, 转动轴为 $\boldsymbol{n}=(n_x, n_y, n_z)$, 这也是第二章给出的转动公式.

由(11.2.8)式可看出 φ 以 2π 为周期.

$$R(n_x, n_y, n_z, \varphi)=R(n_x, n_y, n_z, \varphi+2\pi)$$

由此三个连续参数(n_x, n_y, $n_z=\sqrt{1-n_x^2n_y^2}$, φ)的定义域为 $\mathbf{R}^3$ 空间中半径为 π 的球. 每一个直径在球面上的两个交点 $\pi\boldsymbol{n}$ 和 $-\pi\boldsymbol{n}$ 对应于一个元素, 即每个直径在球面上的两个交点描述一个群元素, 因而, 它们是等价点. 在半径为 π 的球内 Lie 群 $SO(3)$ 是单连通的.

11.2.3　$SU(2)$ 群与 $SO(3)$ 群的关系

由于 $SU(2)$ 和 $SO(3)$ 的无穷小生成元构成同一个 Lie 代数. 因而在原点的无穷小邻域内, $SU(2)$ 和 $SO(3)$ 群的元素存在一一对应的关系, 即 $SU(2)$ 群和 $SO(3)$ 群局部同构, 但在整体上 $SU(2)$ 群的定义域是 $\mathbf{R}^3$ 中半径为 2π 的球, $SO(3)$ 群的定义域是 $\mathbf{R}^3$ 中半径为 π 的球, 因而两者在整体上不可能同构.

为了检查 $SU(2)$ 群与 $SO(3)$ 群群元素的对应关系, 把 $SO(3)$ 群的定义域扩展到半径

为 2π 的球上，此时的 $SO(3)$ 记为 $SO(3)^*$. 在这个定义域中当把球面上的点视为等价点时，每个点唯一地对应一个 $SU(2)$ 群的元素. 但是对 $SO(3)^*$ 群，当 φ 由 $-\pi$ 变到 π 时，走遍了 $SO(3)$ 群的全部元素，而 φ 从 π 变到 2π 时和由 $-\pi$ 变到 -2π 时，又经历了 $SO(3)$ 的全部元素. 因而在半径为 2π 的球内 $SO(3)$ 是 2 度连通的，或称双连通的(在数学上说明连通性需要拓扑空间道路同论(homotopy)的概念).

因而在半径为 2π 的球内一个 $SO(3)$ 群的元素对应于两个 $SU(2)$ 群的元素，即 $SU(2)$ 群与 $SO(3)$ 群在整体上是 2 对 1 的同态. 比较(11.2.3′)式和(11.2.8)式可以看到

$$R(\boldsymbol{n},\ \varphi) \to U(\boldsymbol{n},\ \varphi/2)$$

$$R(\boldsymbol{n},\ \varphi + 2\pi) = R(\boldsymbol{n},\ \varphi) \to U\left(\boldsymbol{n},\ \frac{\varphi}{2} + \pi\right) = -U\left(\boldsymbol{n},\ \frac{\varphi}{2}\right)$$

即

$$r(\boldsymbol{n},\ \varphi) \to \begin{cases} U(\boldsymbol{n},\ \varphi/2), \\ -U(\boldsymbol{n},\ \varphi/2), \end{cases} \quad r(\boldsymbol{n},\ 0) = E_{3\times3} \to \begin{cases} E_{2\times2} \\ -E_{2\times2} \end{cases}$$

即同态核为 $SU(2)$ 的元素 $\{E_{2\times2},\ -E_{2\times2}\}$，它们构成 2 维空间的反演群 I_2，它是 $SU(2)$ 群的不变子群，因而它可构成 $SU(2)$ 群的商群 $SU(2)/I_2$，商群 $SU(2)/I_2$ 与 $SO(3)$ 群同构，即 $SU(2)/I_2 = SO(3)^* \sim SO(3)$，称 $SO(3)^*$ 群为双值 $SO(3)$ 群.

这个结果是定理 9.2.4 的具体例证. Lie 代数 A_1 的实形可生成两个 Lie 群 $SU(2)$ 和 $SO(3)$，$SU(2)$ 是单连通 Lie 群，$SO(3)$ 是复连通的，$SU(2)$ 是 $SO(3)$ 的覆盖群.

在第三章为了讨论点群的双值表示，已简单地说明了这些问题.

11.3 Lie 代数 $su(2)$ 和 Lie 群 $SU(2)$ 的不可约表示

根据定理 10.1.3，紧致连通的单 Lie 群的有限维不可约表示都是酉表示，而无限维不可约表示都是非酉表示，因而 Lie 代数 $su(2)$ 的有限维表示是反 Hermitian 表示，指数映射后得到 Lie 群 $SU(2)$ 的有限维酉表示，$su(2)$ 的无限维表示都不是 Hermitian 表示，指数映射后得到 $SU(2)$ 群的无限维表示也不是酉表示.

本节具体讨论 Lie 代数 $su(2)$ 和 Lie 群 $SU(2)$ 的这些不可约表示.

11.3.1 Lie 代数 $su(2)$ 的不可约表示

1. $su(2)$ 不可约表示基矢

(11.1.2)式给出的 Lie 代数 $su(2)$ 的 C-W 基为

$$J_0 = \frac{1}{2}\sigma_3, \quad J_{\pm1} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(\sigma_1 \pm \mathrm{i}\sigma_2) \tag{11.3.1}$$

其中

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

为 Pauli 矩阵.

$su(2)$ 只有一个基础表示，它也是初等表示，这个表示在 Dynkin 图上标记为 $\overset{1}{\circ}$. 由

$$\lambda = \frac{2(\Lambda,\ \alpha)}{(\alpha,\ \alpha)} = 1$$

得到相应的最大权 $\Lambda = \frac{1}{2}$，表示是 2 维的. 因而这个不可约表示的基矢是二维的旋量，即

$$\xi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \xi_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

容易得到

$$\begin{cases} J_0 \xi_1 = \frac{1}{2} \xi_1 \\ J_0 \xi_2 = -\frac{1}{2} \xi_2 \\ J_{+1} \xi_2 = \sqrt{\frac{1}{2}} \xi_1 \\ J_{-1} \xi_1 = \sqrt{\frac{1}{2}} \xi_2 \end{cases} \tag{11.3.2}$$

在由基矢 $\{\xi_1,\ \xi_2\}$ 构成的旋空间中，可定义 $SU(2)$ 群的无穷小算子，即

$$\begin{cases} J_0 = \frac{1}{2}\left(\xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_1} - \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_2}\right) \\ J_+ = \sqrt{\frac{1}{2}} \xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_2} \\ J_- = \sqrt{\frac{1}{2}} \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_1} \end{cases} \tag{11.3.3}$$

容易证明它们满足交换关系(11.1.3)，即 Lie 代数 $su(2)$，而且与 $\{\xi_1,\ \xi_2\}$ 相作用也得到(11.3.2)的结果，它们为 $SU(2)$ 群的无穷小算子.

n 秩 Lie 代数的 n 个基本表示的各种直积分解可得到该 Lie 代数的所有不可约表示，因而 $(\xi_1,\ \xi_2)$ 构成的旋空间的各种直积，可构成 Lie 代数各种不可约表示的空间. 于是可定义

$$|a,\ b\rangle = N(a,\ b)\xi_1^a \xi_2^b \tag{11.3.4}$$

$N(a,\ b)$ 为归一化常数，对于 $\frac{1}{2}(a+b) = \psi$ 为一定值的全部可能的 $|a,\ b\rangle$，构成以 ψ 标记的旋空间 V_ψ，即

$$V_\psi = \{\ |a,\ b\rangle \mid \frac{1}{2}(a+b) = \psi \text{ 为定值}\}$$

下面可证明它是 Lie 代数 $su(2)$ 表示空间.

用(11.3.3)定义的 $su(2)$ 的 C-W 基中的 J_0 作用基矢 $|a,\ b\rangle$ 得到

$$J_0 |a,\ b\rangle = N(a,\ b)\frac{1}{2}(a-b)\xi_1^a \xi_2^b = \frac{1}{2}(a-b)|a,\ b\rangle \tag{11.3.5}$$

这表明 $|a,\ b\rangle$ 的权为 $\frac{1}{2}(a-b)$，$J_{\pm 1}$ 作用则为

$$\begin{cases} J_{+1}\mid a,\ b\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}N(a,\ b)b\xi_1^{a+1}\xi_2^{b-1} \\ \qquad = \dfrac{b}{\sqrt{2}}\dfrac{N(a,\ b)}{N(a+1,\ b-1)}\mid a+1,\ b-1\rangle \\ J_{-1}\mid a,\ b\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}N(a,\ b)a\xi_1^{a-1}\xi_2^{b+1} \\ \qquad = \dfrac{a}{\sqrt{2}}\dfrac{N(a,\ b)}{N(a-1,\ b+1)}\mid a-1,\ b+1\rangle \end{cases} \tag{11.3.5'}$$

从而说明 $J_{\pm1}$ 使基矢 $|a,\ b\rangle$ 在空间 V_ψ 中变化，即 V_ψ 是 Lie 代数 $su(2)$ 的不变空间. 用(11.1.4)式表示的 Casimir 算子 $\hat{C}$ 作用 $|a,\ b\rangle$ 得到

$$\begin{aligned} \hat{C}\mid a,\ b\rangle &= [J^2 + 2(J_{+1}J_{-1} + J_{-1}J_{+1})]\mid a,\ b\rangle \\ &= \psi(\psi+1)\mid a,\ b\rangle, \quad \psi = \frac{1}{2}(a+b) \end{aligned} \tag{11.3.6}$$

这证明空间 V_ψ 的所有矢量都是 Casimir 算子的本征矢量，本征值为 $\psi(\psi+1)$，而且

$$J_0 J_{\pm1}|a,\ b\rangle = (J_{\pm1}J_0 \pm J_{\pm1})|a,\ b\rangle = \left(\frac{a-b}{2} \pm 1\right)J_{\pm}|a,\ b\rangle \tag{11.3.7}$$

这表明 $J_{\pm}|a,\ b\rangle$ 除了差一个常数外仍然是权 $\frac{a-b}{2}\pm1$ 的本征矢，也说明基矢的权具有 E_0+x 的形式，其中 x 为正负整数. 因而令

$$\frac{a-b}{2} = E_0 + x \tag{11.3.8}$$

由此可得到可用 ψ 和 E_0 表示 a，b：

$$a = \psi + E_0 + x, \quad b = \psi - E_0 - x \tag{11.3.9}$$

于是把(11.3.4)式描述的基矢改写为

$$\mid \psi,\ E_0 + x\rangle = \mid a,\ b\rangle = N(a,\ b)\xi_1^a\xi_2^b = N(x)(\xi_1\xi_2)^{\psi}(\xi_1/\xi_2)^{E_0+x} \tag{11.3.10}$$

它们所张成的空间记为 $V(\psi,\ E_0)$，即

$$V(\psi,\ E_0) = \{|\psi,\ E_0+x\rangle,\ x=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots\}$$

令这种基矢是正交归一化的，即

$$\langle\psi,\ E_0+x|\psi,\ E_0+x'\rangle = \delta_{xx'}$$

于是(11.3.5)和(11.3.5′)式变为

$$\begin{cases} J_0\mid\psi,\ E_0+x\rangle = (E_0+x)\mid\psi E_0+x\rangle \\ J_{\pm}\mid\psi,\ E_0+x\rangle = \sqrt{\dfrac{1}{2}}(\psi\mp(E_0+x))\dfrac{N(x)}{N(x\pm1)}\mid\psi,\ E_0+x\pm1\rangle \end{cases} \tag{11.3.11}$$

因而矩阵元为

$$\begin{cases} \langle\psi,\ E_0+x+1\mid J_{+1}\mid\psi,\ E_0+x\rangle = \sqrt{\dfrac{1}{2}}\dfrac{N(x)}{N(x+1)}(\psi-(E_0+x)) \\ \langle\psi,\ E_0+x-1\mid J_{-1}\mid\psi,\ E_0+x\rangle = \sqrt{\dfrac{1}{2}}\dfrac{N(x)}{N(x-1)}(\psi+E_0+x) \end{cases} \tag{11.3.12}$$

注意到 $J_{+1}^{+}=J_{-1}$，因而

$$\{\langle\psi, E_0+x+1 \mid J_{+1} \mid \psi, E_0+x\rangle\}$$
$$=\langle\psi, E_0+x \mid J_{-1} \mid \psi, E_0+x+1\rangle^*$$

由此得到

$$\frac{N(x)}{N(x+1)}(\psi-(E_0+x))=\left(\frac{N(x+1)}{N(x)}\right)^*(\psi+E_0+x+1)^*$$

即

$$\left|\frac{N(x)}{N(x+1)}\right|^2=\frac{(\psi+E_0+x+1)^*}{\psi-(E_0+x)} \tag{11.3.13}$$

这就确定了归一化系数. 按 Condon-shartley 相因子规约，由(11.3.13)式得到

$$N(x)=[(\psi+E_0+x)!\ (\psi-E_0-x)!]^{-1/2} \tag{11.3.14}$$

由此得到 $J_{\pm1}$ 的矩阵元为

$$(\psi, E_0+x+1) \mid J_{+1} \mid \psi, E_0+x\rangle=\left[\frac{1}{2}(\psi-E_0-x)(\psi+E_0+x+1)\right]^{1/2}$$

$$\langle\psi, E_0+x+1) \mid J_{-1} \mid \psi, E_0+x\rangle=\left[\frac{1}{2}(\psi+E_0+x)(\psi-E_0-x+1)\right]^{1/2}$$

由基矢 $\{|\psi_1E_0+x\rangle, x=0, \pm1, \pm2, \cdots\}$ 所张成的空间 $V(\psi, E_0)$，通过对 ψ 和 E_0 的选择，可得到 $su(2)$ 的所有不可约表示.

根据定理 10.1.3，连通紧致 Lie 群有限维不可约表示是酉表示，无限维不可约表示是非酉表示. 因而相应 Lie 代数的有限维表示是 Hermitian 表示，无限维表示是非 Hermitian 表示，下面就来讨论这两种表示.

2. $su(2)$ 的有限维表示

如果取 a, b 都为正整数，因而 $\psi=\frac{1}{2}(a+b)=j$ 为正整数或半整数，当 j 为整数时，$E_0=0$；当 j 为半整数时，$E_0=\frac{1}{2}$，权 m 为正负整数或正负半整数，于是(11.3.10)式变为

$$\{|j, m\rangle=N(m)\xi_1^{j+m}\xi_1^{j-m}\} \tag{11.3.15}$$

对一定不可约表示 j 为一定值. 显然当 $m=j$ 和 $m=-j$ 时

$$|j, j\rangle=N(j)\xi_1^{2j}, \ |j, -j\rangle=N(-j)\xi_2^{2j}$$

于是

$$J_{+1}|j, j\rangle=0, \quad J_{-1}|j, -j\rangle=0 \tag{11.3.16}$$

而且

$$\begin{cases} J_0 \mid j, m\rangle = m \mid j, m\rangle \\ J_{\pm1} \mid j, m\rangle = N(m)/N(m\pm1) \mid j, m\pm\rangle \\ J_0J_{\pm1} \mid j, m\rangle = (m\pm1)J_{\pm1} \mid j, m\rangle \end{cases} \tag{11.3.17}$$

这就证明了 $2j+1$ 维的空间 $V(j)$

$$V(j)=\{|j, m\rangle, m=j, j-1, \cdots, -j\}$$

是 Lie 代数 $su(2)$ 的不变空间，因而它荷载了 $2j+1$ 维的不可约表示 $D^{(j)}$，(11.3.13) 给出的归一化系数在这种情况下变为

$$N(\pm m)=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)} \tag{11.3.18}$$

利用(11.3.16)式可得到 J_0，$J_{\pm 1}$ 的矩阵元，即

$$\begin{cases}\langle j'm' \mid J_0 \mid jm\rangle = \delta_{mm'}\delta_{jj'}m \\ \langle j'm' \mid J_{+1} \mid jm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{m',m+1}\dfrac{1}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \\ \langle j'm' \mid J_{-1} \mid jm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{m',m-1}\dfrac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \\ \langle j'm' \mid J_x \mid jm\rangle = \dfrac{1}{2}\delta_{jj'}[\delta_{m',m+1}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}+\delta_{m;m-1}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}] \\ \langle j'm' \mid J_y \mid jm\rangle = \dfrac{1}{2\mathrm{i}}\delta_{jj'}[\delta_{m',m+1}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}-\delta_{m;m-1}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}]\end{cases} \tag{11.3.19}$$

由(11.3.17)式给出的 $J_0=J_z$，J_x 和 J_y 的矩阵元可看到它们都是 Hermiti 矩阵(J_z，J_x，J_y 均为 Hermiti 算子)．即矩阵元由(11.3.18)式给出的表示矩阵 $\hat{D}(J\alpha)(\alpha=x, y, z)$ 具有性质 $(J\alpha)^+=(J\alpha)$，或 $\langle jm'|J_\alpha|jm\rangle=\langle jm|J_\alpha|jm'\rangle^*$．因而这种有限维表示为 Hermiti 表示，Hermiti 矩阵 X 经指数映射 $Y=\exp(\mathrm{i}X)$ 之后得到酉矩阵，因此由 Lie 代数 $su(2)$ 为 Hermiti 表示可得到 Lie 群 $SU(2)$ 的酉表示．

3. $su(2)$ 的无限维表示

无限维表示可分三种情况，下面分别进行讨论．

1° 权有下界而无上界的表示

取 a 为整数，b 为任意数，则基矢组 $\{|a, b\rangle, a=0, \pm 1, \pm 2, \cdots, b$ 任意 $\frac{1}{2}(a+b)=\psi$ 为定值$\}$ 中存在 $|0, b'\rangle$，使

$$J_{-1}|0, b'\rangle=0,\ J_0|0, b'\rangle=-\frac{b'}{2}|0, b'\rangle \tag{11.3.20}$$

此时 $\psi=\frac{1}{2}(a+b)=\frac{b'}{2}$．而

$$\begin{cases}J_{+1} \mid 0, b'\rangle = \dfrac{N(0, b')}{N(1, b')} \mid 1, b'\rangle \\ J_0J_{+1} \mid 0, b'\rangle = \left(-\dfrac{b'}{2}+1\right)J_{+1} \mid 0, b'\rangle\end{cases} \tag{11.3.20'}$$

由此得到权

$$\Lambda=E_0+x=-\frac{b'}{2}+x,\quad x=0, 1, 2, \cdots,\quad E_0=-\frac{b'}{2}$$

而且

$$J_{+1}^n|a, b'\rangle\neq 0$$

这样就得到了无上界的无限维不可约表示，表示空间 $V\left(\psi, -\frac{b}{2}\right)=V\left(\frac{b'}{2}\right)$，基矢为

$$\left\{|\psi,\ -\frac{b'}{2}+x\rangle,\ x=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ \infty\right\}$$

显然这无穷多维的空间是 $su(2)$ 的不变空间，给出了权无上界而有下界的不可约表示.

2° 权有上界而无下界的表示

如果 b 为整数，a 任意，此时可得到与上节类似的结果，即

$$\psi=\frac{a'}{2},\quad \Lambda=\frac{a'}{2}-x,\quad x=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ \infty$$

这个表示权 $\Lambda=\frac{a'}{2}-x$ 有上界 $\frac{a'}{2}$，无下界. 表示空间为 $V\left(\psi,\ \frac{a'}{2}\right)=V\left(\frac{a'}{2}\right)$ 的基矢为

$$\left\{|\psi,\ \frac{a'}{2}-x\rangle,\ x=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ \infty\right\}$$

3° 权上下都无界的表示

取 a, b 都不是整数，此时权为

$$\Lambda=E_0+x,\quad x=0,\ \pm1,\ \cdots,\ \pm\infty$$

$$-\frac{1}{2}<E_0<\frac{1}{2},\quad E_0=\frac{1}{2}(a-b) \tag{11.3.21}$$

可得到权上下都无界的表示，它的基矢为

$$\{|\psi,\ E_0+x\rangle,\ x=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots,\ \pm\infty\}$$

记这种表示空间为 $V(\psi,\ E_0)$.

4° 无限维表示是非 Hermitian 表示

由于

$$J_+{}^+=J_-,\quad J_+=J_-{}^+$$

如果是 Hermitian 表示，一定使表示矩阵

$$D(J_+{}^+)=D(J_+)^+$$

由此得到

$$\begin{aligned}&\langle\psi,\ E_0+x+1\,|\,J_+|\,\psi,\ E_0+x\rangle\\&=\langle\psi,\ E_0+x+1\,|\,J_-{}^+|\,\psi,\ E_0+x\rangle\\&=\langle\psi,\ E_0+x\,|\,J_{-1}\,|\,\psi,\ E_0+x+1\rangle^*\end{aligned} \tag{11.3.22}$$

利用基矢 $\{|\psi,\ E_0+x\rangle\}$ 的正交归一性，可得到

$$\begin{aligned}&\langle\psi,\ E_0+x\,|\,J_{+1}J_{-1}\,|\,\psi,\ E_0+x\rangle\\&=\sum_{x'}\langle\psi,\ E_0+x\,|\,J_{+1}\,|\,\psi,\ E_0+x'\rangle\langle\psi,\ E_0+x'\,|\,J_{-1}\,|\,\psi,\ E_0+x\rangle\\&=\langle\psi,\ E_0+x\,|\,J_{+1}\,|\,\psi,\ E_0+x-1\rangle\langle\psi,\ E_0+x-1\,|\,J_{-1}\,|\,\psi,\ E_0+x\rangle\end{aligned}$$

因而由(11.3.22)式得到

$$\begin{aligned}&\langle\psi,\ E_0+x\,|\,J_{+1}J_{-1}\,|\,\psi,\ E_0+x\rangle\\&=|\langle\psi,\ E_0+x-1\,|\,J_{-1}\,|\,\psi,\ E_0+x\rangle^2 1\geqslant 0\end{aligned} \tag{11.3.23}$$

代入(11.3.12)式，(11.3.23)式为

$$\begin{cases}(\psi+E_0+x+1)(\psi-E_0-x)\geqslant 0\\(\psi+E_0+x)(\psi-E_0-x+1)\geqslant 0\end{cases} \tag{11.3.24}$$

但是对于三种无限维表示，无论 $x=1,2,\cdots,\infty$，$x=-1,-2,\cdots,-\infty$ 或 $x=\pm1,\pm2,\cdots,\pm\infty$ 都不可能满足(11.3.24)式，因而无限维表示都不是 Hermitian 表示.

11.3.2 $SU(2)$群的有限维不可约表示

在 11.2 节已指出以 Lie 代数 $su(2)$ 为无穷小算子的紧致 Lie 群有 $SU(2)$ 和 $SO(2)$，$SU(2)$ 是 $SO(3)$ 的通用覆盖群. 根据定理 10.1.3，Lie 代数 $su(2)$ 的不可约表示与 $SU(2)$ 群的不可约表示一一对应，因而可从 $su(2)$ 的不可约表示通过指数映射得到 $SU(2)$ 群的全部不可约表示. 由于在物理学和化学中主要使用 $SU(2)$ 群的有限维酉表示，因而本节权限于讨论 $SU(2)$ 群的有限维酉表示.

2×2 单模酉矩阵为

$$\sigma=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ -\beta^* & \alpha^*\end{pmatrix},\quad \sigma^{-1}=\begin{pmatrix}\alpha^* & -\beta\\ \beta^* & \alpha\end{pmatrix},\quad \det\sigma=\alpha\alpha^*+\beta\beta^*=1$$

σ 中的复数 α,β 中三个独立变化的实参数可取定义域中任何值，因而 σ 为 $SU(2)$ 群的任意元素. σ 对 ξ_1 和 ξ_2 的作用为

$$\begin{cases}\sigma\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha\xi_1+\beta\xi_2\\ -\beta^*\xi_1+\alpha^*\xi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\xi_1'\\ \xi_2'\end{pmatrix}\\ \sigma^{-1}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha^*\xi_1-\beta\xi_2\\ \beta^*\xi_1+\alpha\xi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\xi_1''\\ \xi_2''\end{pmatrix}\end{cases}\tag{11.3.25}$$

群算子 $\hat{P}(\sigma)$ 对函数 $f(\xi_1,\xi_2)$ 的作用为

$$\hat{P}(\sigma)f(\xi_1,\xi_2)=f(\sigma^{-1}(\xi_1,\xi_2))\tag{11.3.26}$$

因而 $\hat{P}(\sigma)$ 对(11.3.10)式给出的基矢 $|\psi,E_0+x\rangle$ 的作用为

$$\begin{aligned}&\hat{P}(\sigma)\mid\psi,E_0+x\rangle\\ &=N(x)(\alpha^*\xi_1-\beta\xi_2)^{\psi+E_0+x}(\beta^*\xi_1+\alpha\xi_2)^{\psi+E_0-x}\end{aligned}\tag{11.3.27}$$

(11.3.25)式中的 $(\alpha^*\xi_1-\beta\xi_2)^{\psi+E_0+x}$ 和 $(\beta^*\xi_1+\alpha\xi_2)^{\psi+E_0-x}$ 按二项式定理展开，然后把 ξ_1 和 ξ_2 的项合在一起，得到

$$\begin{aligned}&\hat{P}(\sigma)\mid\psi,E_0+x\rangle\\ &=N(x)\sum_{k,k'=0}^{\infty}(-1)^k\frac{(\psi+E_0+x)!(\psi-E_0-x)!}{(\psi+E_0+x-k)!(\psi-E_0-x-k')}\\ &\quad\cdot\frac{1}{k!k'!}\alpha^{*\psi+E_0+x-k}\beta^{*\psi-E_0-x-k'}\alpha^{k'}\beta^k\xi_1^{2\psi-k-k'}\xi_2^{k+k'}\end{aligned}\tag{11.3.28}$$

因为 $(\psi+E_0+x)$，$(\psi-E_0-x)$，$(\psi+E_0+x-k)$，$(\psi-E_0-x-k')$ 不是整数，甚至是复数，在二项式定理展开中它们的阶乘应当为 Γ 函数，即 $p!=\Gamma(p+1)$.

如果令

$$k+k'=\Psi-E_0-x',\quad k'=\Psi-E_0-x'+k\tag{11.3.29}$$

则(11.3.28)式变为

$$\hat{P}(\sigma)\mid\psi,E_0+x\rangle$$
$$=\sum_{k,x'}\frac{N(x)}{N(x')}(-1)^k\frac{(\psi+E_0+x)!(\psi-E_0-x)!}{(\psi+E_0+x-k)!(x'-x+k)!}\frac{1}{k!(\psi-E_0-x'-k)!}$$
$$\cdot\alpha^{*\psi+E_0+x-k}\beta^{*x'-x+k}\alpha^{\psi-E_0-x'-k}\beta^k\mid\varphi,E_0+x'\rangle$$

即

$$\hat{P}(\sigma)\mid\psi,E_0+x\rangle=\sum_{x'}D^{(\psi)}(\sigma)_{x'x}\mid\varphi,E_0+x'\rangle \tag{11.3.30}$$

其中

$$D^{(\psi)}(\sigma)_{x'x}=\frac{N(x)}{N(x')}\sum_k\frac{(\psi+E_0+x)!(\psi-E_0-x)!}{(\psi+E_0+x-k)!(x'-x+k)!}\frac{1}{k!(\psi-E_0-x'-k)!}$$
$$\cdot\alpha^{*\psi+E_0+x-k}\beta^{*x'-x+k}\alpha^{\psi-E_0-x'-k}\beta^k \tag{11.3.31}$$

对于有限维表示，$\psi-E_0$ 为整数，并取 $\psi=\frac{1}{2}(a+b)=j$(正整数或半整数)，取 $E_0+x=m$，$E_0+x'=m'$，于是(11.3.30)式变为

$$D^{(j)}(\sigma)_{m'm}=\frac{N(m)}{N(m')}\sum_k(-1)^k\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+m-k)!(m'-m+k)!k!(j-m'-k)!}$$
$$\cdot\alpha^{*j+m-k}\beta^{*m'-m+k}\alpha^{j-m'-k}\beta^k$$

代入(11.3.14)式给出的 $N(m)$ 和 $N(m')$ 得到

$$D^{(j)}(\sigma)_{m'm}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k[(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2}}{k!(j+m-k)!(j-m'-k)!(m'-m+k)!}$$
$$\cdot\alpha^{j-m'-k}\alpha^{*j+m-k}\beta^k\beta^{*(m'-m+k)} \tag{11.3.32}$$

通常用 Euler 角(φ,θ,ψ)表示酉矩阵，即

$$\sigma(\varphi,\theta,\psi)=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ -\beta^* & \alpha^*\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varphi+\psi)/2}\cos\theta/2 & -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varphi-\psi)/2}\sin\theta/2\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi-\psi)/2}\sin\theta/2 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi+\psi)/2}\cos\theta/2\end{pmatrix} \tag{11.3.33}$$

即

$$\alpha=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi+\psi)/2}\cos\theta/2,\quad\beta=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varphi-\psi)/2}\sin\theta/2 \tag{11.3.33'}$$

把它们代入(11.3.32)式得到

$$D^{(j)}(\varphi,\theta,\psi)_{m'm}$$
$$=\sum_k\frac{(-1)^k[(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2}}{k!(j+m-k)!(j-m'-k)!(m'-m+k)!}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$$
$$\cdot\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j+m-m'-2k}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi} \tag{11.3.34}$$

对 k 的求和要保证上式中阶乘的存在. 这便是一般书上用 Euler 角(φ,θ,ψ)表示的 $SU(2)$群不可约表示矩阵的表达式，显示它是酉表示.

利用表示基矢$|j,m\rangle$的正交归一性，通常可把表示矩阵 $D^{(j)}(\varphi,\theta,\psi)_{m'm}$写为

$$D^{(j)}(\varphi,\theta,\psi)_{mm'}=\langle j,m|\hat{P}(\varphi,\theta,\psi)|j,m'\rangle \tag{11.3.34'}$$

其中 $\hat{P}(\varphi,\theta,\psi)$为与元素 $\sigma(\varphi,\theta,\psi)$相应的群算子.

下面证明(11.3.34)式给出的表示是不可约酉表示.

1. (11.3.34)式给出的表示为酉表示

对于有限维表示，(11.3.15)式给出的基矢为

$$| j, m = N(m)(\zeta_1\zeta_2)^j(\zeta_1/\zeta_2)^m$$
$$= \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\zeta_1^{j+m}\zeta_2^{j-m}, \quad m=-j, -j+1, \cdots, j$$

其中取(11.3.14)给出的归一化系数 $N(m)$，由此可得到

$$\sum_m \langle jm | jm\rangle = \sum_m \frac{1}{(j+m)!(j-m)!}(\zeta_1\zeta_1^*)^{j+m}(\zeta_2\zeta_2^*)^{j-m}$$
$$= \frac{1}{(2j)!}\{| \zeta_1 |^2 + | \zeta_2 |^2\}^{2j}$$

而由(11.3.2)式可看到$|\zeta_1|^2+|\zeta_2|^2$是 $SU(2)$群作用下的不变量，因而 $\sum\limits_m \langle jm | jm\rangle$ 也是 $SU(2)$群作用下的不变量. 令

$$\hat{P}(\sigma) | jm\rangle = jm\rangle' = \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j+m)!}}\zeta_1'^{j+m}\zeta_2'^{j-m}$$
$$\sigma\zeta_1 = \zeta_1', \qquad \sigma\zeta_2 = \zeta_2'$$

于是

$$\sum_m \langle jm | jm\rangle' = \frac{1}{(2j)!}\{| \zeta_1' |^2 + | \zeta_2' |^2\}^{2j}$$
$$= \sum_m \langle jm | jm\rangle = \frac{1}{(2j)!}\{| \zeta_1 |^2 + | \zeta_2 |^2\}^{2j}$$

另一方面

$$\hat{P}(\sigma)|jm\rangle = D^{(j)}(\sigma)_{m'm}|jm'\rangle$$

因而

$$\sum_m \langle jm | jm\rangle' = \sum_m \sum_{m_1m_2} D^{(j)}(\sigma)^*_{m_1m}D^{(j)}(\sigma)_{m_2m}\langle jm_1 | jm_2\rangle$$
$$= \sum_m \langle jm | jm\rangle$$

这便要求

$$\sum_m D^{(j)}(\sigma)^*_{m_1m}D^{(j)}(\sigma)_{m_2m} = \sum_m D^{(j)}(\sigma)_{m_2m}D^{(j)}(\sigma)^+_{mm_1} = \delta_{m_1m_2}$$

从而证明了为酉表示.

2. (11.3.34)式给出的表示为不可约表示

令$(2j+1)\times(2j+1)$阶的矩阵 A 与所有表示矩阵 $D^{(j)}(\sigma)$都变换，即

$$AD^{(j)}(\sigma) = D^{(j)}(\sigma)A$$

亦即

$$\sum_{m'} A_{mm'}D^{(j)}(\sigma)_{m'm''} = \sum_{m'} D^{(j)}(\sigma)_{mm'}A_{m'm''}$$

现在取一个特征的表示矩阵 $\alpha = e^{\frac{i\varphi}{2}}$, $\beta=0$, 它为

$$D^{(j)}(e^{\frac{i\varphi}{2}}, 0)_{m'm} = \delta_{mm'}e^{im\varphi}$$

矩阵 A 既然与全部表示矩阵交换，当然与 $D^{(j)}(e^{\frac{i\varphi}{2}}, 0)$ 交换，由此得到

$$\sum_{m'} A_{mm'} D^{(j)}(e^{\frac{i\varphi}{2}}, 0)_{m'm''} = \sum_{m'} D^{(j)}(e^{\frac{i\varphi}{2}}, 0)_{mm'} A_{m'm''}$$

亦即

$$A_{mm''} D^{(j)}(e^{\frac{i\varphi}{2}}, 0)_{m''m''} = D^{(j)}(e^{\frac{i\varphi}{2}}, 0)_{mm} A_{mm''}$$

于是

$$A_{mm''}(e^{im''\varphi} - e^{im\varphi}) = 0, \quad A_{mm''} = \delta_{mm''} a_m$$

另一方面，计算

$$[AD^{(j)}(\sigma)]_{jm} = [D^{(j)}(\sigma)A]_{jm}$$

即

$$\sum_{m'} A_{jm'} D^{(j)}(\sigma)_{m'm} = \sum_{m'} D^{(j)}(\sigma)_{jm} A_{m'm}$$

由 $A_{m'm} = \delta_{mm'} a_m$ 得到

$$A_{jj} D^{(j)}(\sigma)_{jm} = D^{(j)}(\sigma)_{jm} A_{mm}$$

由此得到 $A_{jj} = A_{mm}$，即 A 为常数矩阵，由 Schur 引理证明了 $D^{(j)}(\sigma)$ 为不可约表示.

11.3.3　$SO(3)$ 群的有限维酉表示

1. 由 $SU(2)$ 群的有限维酉表示得到 $SO(3)$ 群的有限维酉表示

在(11.2.3)节中已指出了 $SU(2)$ 群与 $SO(3)$ 群同态，而且

$$\left.\begin{array}{l} U\left(\boldsymbol{n}, \frac{\varphi}{2}\right) \\ U\left(\boldsymbol{n}, \frac{2\pi + \varphi}{2}\right) = -U\left(\boldsymbol{n}, \frac{\varphi}{2}\right) \end{array}\right\} \Rightarrow R(\boldsymbol{n}, \varphi)$$

为了方便讨论，下面把 $R(\boldsymbol{n}, \varphi)$ 也用 Euler 角 (φ, θ, ψ) 表示出来，由于

$$R(\varphi, \theta, \psi) = C_z(\varphi) C_y(\theta) C_z(\psi) \tag{11.3.35}$$

其中 $C_z(\varphi)$，$C_y(\theta)$ 表示在固定坐标系中，绕 z 和 y 轴分别转动 φ 角和 θ 角. 利用无穷小算子的指数映射可得到

$$R(\varphi, \theta, \psi) = e^{-i\varphi L_z} e^{-i\theta L_y} e^{-i\psi L_z}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\varphi\cos\theta\cos\psi - \sin\varphi\sin\psi & -\cos\varphi\cos\theta\sin\psi - \sin\varphi\sin\psi & \cos\varphi\sin\theta \\ \sin\varphi\cos\theta\cos\psi + \cos\varphi\sin\psi & -\sin\varphi\cos\theta\sin\psi + \cos\varphi\cos\psi & \sin\varphi\sin\theta \\ -\sin\theta\cos\psi & \sin\theta\sin\psi & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{11.3.35'}$$

此即第三章的(3.5.10)式，与用 Euler 角表示的 $SU(2)$ 群的元素相比较，得到

$$\left.\begin{array}{l} U(\varphi, \theta, \psi) \\ U(\varphi + 2\pi, \theta + 2\pi, \psi + 2\pi) = -U(\varphi, \theta, \psi) \end{array}\right\} \Rightarrow R(\varphi, \theta, \psi) \tag{11.3.36}$$

由(11.3.34)式可看到 $SU(2)$ 群的不可约表示矩阵，当 j 为整数时，

$$D^{(j)}(\varphi, \theta, \psi) = D^{(j)}(\varphi + 2\pi, \theta + 2\pi, \psi + 2\pi) \tag{11.3.37}$$

而当 j 为半整数时，

$$D^{(j)}(\varphi, \theta, \psi) = -D^{(j)}(\varphi + 2\pi, \theta + 2\pi, \psi + 2\pi) \tag{11.3.37'}$$

因而对于j=整数的$SU(2)$群的不可约表示，同时也是$SO(3)$群的不可约表示. 因为在$0\leqslant\varphi\leqslant2\pi$，$0\leqslant\theta\leqslant\pi$，$0\leqslant\psi\leqslant2\pi$ 的定义域内，$SU(2)$群的元素包括 $U(\varphi,\theta,\psi)$和$-U(\varphi,\theta,\psi)=U(\varphi+2\pi,\theta+2\pi,\psi+2\pi)$. 用$X$表示 Euler 角$(\varphi,\theta,\psi)$，则群$SU(2)$的元素$\pm U(X)$对应于$SO(3)$群的元素$R(X)$. 对$j=0,1,2,\cdots$，并记为$L$，则$SU(2)$群的不可约表示

$$D^{(L)}(U(X))=D^{(L)}(-U(X))$$

它们为$SO(3)$群元素$R(X)$的不可约表示，即

$$D^{(L)}(R(X))=D^{(L)}(U(X))=D^{(L)}(-U(X)) \tag{11.3.38}$$

因为

$$\begin{aligned}
&D^{(L)}(R(X))D^{(L)}(R(X'))\\
&=D^{(L)}(\pm U(X))D^{(L)}(\mp U(X'))\\
&=D^{(L)}(-U(X)U(X'))\\
&=D^{(L)}(U(X)U(X'))\\
&=D^{(L)}(R(X))D^{(L)}(R(X))
\end{aligned} \tag{11.3.39}$$

这里$D^{(L)}(R(X))$表示$SO(3)$群元素$R(X)$的表示矩阵，$D^{(L)}(U(X))$代表$SU(2)$群元素$U(X)$的表示矩阵. (11.3.39)式符合表示的定义.

但是$j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\cdots$，半整数时，$SU(2)$群的不可约表示$D^{(j)}(U(X))$却不构成$SO(3)$群的表示. 因为若定义$SU(2)$群不可约表示$D^{(j)}$($j$为半整数)为$SO(3)$群的不可约表示，即

$$D^{(j)}(U(X))=D^{(j)}(R(X))$$

而

$$D^{(j)}(U(X))=-D^{(j)}(U(X))$$

但是$U(X)$和$-U(X)$对应于$SO(3)$群的同一个元素$R(X)$，它对应两个表示矩阵，即

$$D^{(j)}(R(X))=\begin{cases}D^{(j)}(U(X))\\ D^{(j)}(-U(X))=-D^{(j)}(U(X))\end{cases}$$

于是

$$\begin{aligned}
&D^{(j)}(R(X))D^{(j)}(R(X'))\\
&=D^{(j)}(\pm U(X))D^{(j)}(\mp U(X))\\
&=\pm D^{(j)}(R(X))D^{(j)}(R(X'))\\
&=\pm D^{(j)}(R(X)R(X')
\end{aligned} \tag{11.3.40}$$

这并不符合表示的定义. 按第一章关于表示的定义，一定要求群元素g_1和g_2的表示矩阵之积为元素积的表示矩阵，即

$$D(g_1)D(g_2)=D(g_1g_2)$$

为了由$SU(2)$群的j为半整数的表示也得到$SO(3)$群的表示，扩广表示的定义.

定义 11.3.1 如果群G的所有元素$g_i\in G$都定义一个$n\times n$的矩阵$\pm D(g_i)$，使$\pm D(g_i)$与g_i相对应，而且

$$D(g_i)D(g_j) = \pm D(g_ig_j)$$

则称矩阵集合$\{D(g_i), g_i\in G\}$为群 G 的双值表示.

这样由 $SU(2)$群的有限维酉表示得到了 $SO(3)$群的有限维单值表示和双值表示.

所谓单值表示就是$j=L$为整数的表示，与之对应的双值表示是j为半整数的表示.

2. $SO(3)$群单值表示的基矢与表示矩阵

群的表示矩阵具体形式由表示空间的基矢决定，上节讨论的 $SU(2)$群的不可约表示基矢为$\{|E_0+x\rangle, x=0, \pm1, \pm2, \cdots\}$. 由于 $SU(2)$与 $SO(3)$同态，因而这些表示矩阵确实也构成 $SO(3)$群的表示. 但是对 $SO(3)$群这样的表示矩阵的相应的基矢是什么? 下面就讨论这一问题.

$SO(3)$群保持 $\mathbf{R}^3$ 空间的向量长度不变. 因而函数$f(\boldsymbol{r})$在 $SO(3)$元素 $R(\varphi, \theta, \psi)$作用下为

$$\hat{P}(R)f(\boldsymbol{r}) = f(R^{-1}\boldsymbol{r}) = f(\boldsymbol{r}')$$
$$|\boldsymbol{r}| = |\boldsymbol{r}'|$$

因而在球坐标系中讨论 $SO(3)$群不可约表示的基矢是方便的，在球坐标系中，

$$\boldsymbol{r} = (\varphi, \theta, \gamma)$$

r为向量$\boldsymbol{r}$的长度，它们与直角坐标系中的坐标x, y, z的关系为

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta$$

θ为$\boldsymbol{r}$与z轴的夹角，φ为$\boldsymbol{r}$在x-y平面上投影与x轴的夹角. 因而 $SO(3)$群不可约表示的基矢为函数$f(\theta, \varphi)$, $SO(3)$群的无穷小算子在球坐标系中为

$$L_z = -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad L_\pm = \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{11.3.41}$$

令不可约表示l的基矢为$\{\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi), m=-l, -l+1, \cdots, l\}$它具有性质

$$\begin{cases} L_z\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi) = m\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi) \\ L_\pm\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi) = [(l\mp m)(l\pm m+1)]^{1/2}\mathrm{Y}^{l=1}_{m\pm1}(\theta, \varphi) \\ \hat{C}\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi) = l(l+1)\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi) \end{cases} \tag{11.3.42}$$

下面讨论基函数 $\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi)$满足的微分方程

利用L_z的微分形式，得到

$$L_z\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi) = -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi) = m\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi)$$

因而 $\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi)$可分离为

$$\mathrm{Y}^l_m(\theta, \varphi) = Q^l_m(\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \tag{11.3.43}$$

函数 $Q^m_l(\theta)$待定.

对于 $Q^l_l(\theta)$，由于

$$L_+Q^l_l(\theta) = 0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}Q^l_l - l\cot\theta Q^l_l = 0 \tag{11.3.44}$$

因而

$$Q^l_l(\theta) = C_l\sin^l\theta = C_l(1-\cos^2\theta)^{l/2} \tag{11.3.45}$$

C_l 为归一化系数. 由 $Q_l^l(\theta)$ 可利用降算子 L_- 求出其它 $Q_m^l(\theta)$，比如

$$L_-Y_l^l(\theta,\varphi)=[(l+l)(l-l+1)]^{1/2}Y_{l-1}^l(\theta,\varphi)$$

由此得到

$$-\frac{d}{d\theta}Q_l^l(\theta)-l\cot\theta C_l(1-\cos^2\theta)^{\frac{l}{2}}=[(l+l)(l-l+1)]^{1/2}Q_{l-1}^l(\theta)\quad(11.3.46)$$

如此递推下去，得到

$$-\frac{d}{d\theta}Q_{m+1}^l(\theta)-(m+1)\cot\theta C_{m+1}^l(\theta)=[(l+m+1)(l-m)]^{1/2}Q_m^l(\theta)\quad(11.3.47)$$

考虑到(11.3.45)式，由(11.3.47)式可得到

$$Q_m^l(\theta)=C_l\left[\frac{(l+m)!}{(2l)!\ (l-m)!}\right]^{1/2}(1-\cot\theta)^{-\frac{m}{2}}\frac{d^{l-m}}{d\cos\theta^{l-m}}(1-\cos^2\theta)^l\quad(11.3.48)$$

在(11.3.47)式中令 $m+1=-l$，则

$$\frac{d}{d\theta}Q^l{}_{-l}+l\cot\theta Q^l{}_{-l}=0$$

即

$$L_-Y^l{}_{-l}(\theta,\varphi)=0$$

归一化系数可由

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}|Y_l^l(\theta,\varphi)|^2\sin\theta d\theta d\varphi=1$$

得到

$$C_l=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\left[\frac{(2l+1)!}{4\pi}\right]^{1/2}\quad(11.3.49)$$

相因子 $(-1)^l$ 是为了满足 Conton - Shortley 相位规约而引入的.

通常称 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 为球谐函数(spherical harmonics function)，一般定义

$$\begin{cases}Y_m^l(\theta,\varphi)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}P_m^l(\theta)e^{im\varphi}\\[2mm] Y_m^l(\theta)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}P_m^l(\theta)\\[2mm] P_m^l(\theta)=P_{-m}^l(\theta)=\dfrac{N_m^l}{2^l l!}\sin^\theta\dfrac{d^{l+m}\sin^{2l}\theta}{d\cos\theta^{l+m}}\\[2mm] N_m^l=\left[(l-m)!/(l+m)!\dfrac{2l+1}{2}\right]^{1/2}\end{cases}\quad(11.3.50)$$

其中

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}P_m^l(\theta)=Q_m^l(\theta)$$

$P_m^l(\theta)$ 为联属 Legendre 函数.

寻求到了满足条件(11.3.42)式的基矢后，因为这种基矢所满足的条件与 $SU(2)$ 群中 j 为整数的表示基矢的代数结构是完全一样的，因而它的表示矩阵也就是(11.3.34)式中 j 为整数的表示矩阵，或者说单值表示的表示矩阵.

3. 以 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ 为基矢的 $SO(3)$ 群不可约表示矩阵

按表示的定义

$$\hat{P}(R)Y_m^l(\theta, \varphi) = \sum_{m'} D^{(l)}(R)_{m'm}Y_{m'}^l(\theta, \varphi) \tag{11.3.51}$$

由 Euler 角 α, β, γ 的定义(11.3.35)式

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = C_z(\alpha)C_y(\beta)C_z(\gamma)$$

在(11.3.35)式中 Euler 角为(φ, θ, ψ)，为了不与 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ 相混淆，取为(α, β, γ)，

$$\hat{P}(R(\alpha, 0, 0))Y_m^l(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}P_m^l(\theta)e^{im(\varphi+\alpha)} = e^{im\alpha}Y_m^l(\theta, \varphi)$$

即表示矩阵

$$D^{(l)}((\alpha, 0, 0))_{mm'} = \delta_{mm'}e^{im\alpha}$$

同样

$$D^{(l)}(R(0, 0, \gamma))_{mm'} = \delta_{mm'}e^{im\gamma} \tag{11.3.52}$$

因为 $R(\alpha, 0, 0)$ 和 $R(0, 0, \gamma)$ 都是绕 z 轴转 α 角或转 γ 角，在这种转动下，θ 角不变，而 $\varphi \to \varphi+\alpha$ 或 $\varphi \to \varphi+\gamma$.

$$\begin{aligned}
&\hat{P}(R(\alpha, \beta, \gamma))Y_m^l(\theta, \varphi) \\
&= \hat{P}(R(\alpha, 0, 0))\hat{P}(R(0, \beta, 0))\hat{P}(R(0, 0, \gamma))Y_m^l(\theta, \varphi) \\
&= \hat{P}(R(\alpha, 0, 0))\hat{P}(R(0, \beta, 0))Y_m^l(\theta, \varphi)e^{im\gamma} \\
&= \sum_{m'} \hat{P}(R(\alpha, 0, 0))D^{(l)}(0, \beta, 0)_{m'm}Y_{m'}^l(\theta, \varphi)e^{mi\gamma} \\
&= \sum_{m'} e^{im'\alpha}D^{(l)}(0, \beta, 0)_{m'm}Y_{m'}^l(\theta, \varphi)e^{mi\gamma}
\end{aligned} \tag{11.3.53}$$

因而

$$D^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma)_{m'm} = e^{im'\alpha}D^{(l)}(0, \beta, 0)_{m'm}e^{im\gamma} = e^{im'\alpha}d^{(l)}(\beta)_{m'm}e^{im\gamma} \tag{11.3.54}$$

在数学上可证明

$$\begin{aligned}
D^l(0, \beta, 0)_{m'm} &= d_{m'm}^{(l)}(\beta) \\
&= \sum_k \frac{(-1)^k[(l+m)!(l-m)!(l+m')!(l-m')!]^{1/2}}{k!(l+m'-k)!(l-m-k)!(m-m'+k)!} \\
&\quad \cdot \cos^{2l+m-m'-2k}\left(\frac{\beta}{2}\right)\sin^{2k+m-m'}\left(\frac{\beta}{2}\right)
\end{aligned} \tag{11.3.55}$$

即与(11.3.34)式完全一致.

因为 $SO(3)$ 群是三维空间向量保持 r^2 不变的线性变换，因而 $SO(3)$ 群单值表示的表示空间一定是(x, y, z)的 l 阶的齐次多项式所构成的函数空间$\{f^l(\boldsymbol{r})\}$. 这种多项式满足 Laplace 方程

$$\nabla^2 f^l(\boldsymbol{r}) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)f^l(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{11.3.56}$$

满足(11.3.56)式的全部 l 阶齐次多项式 $f^l(\boldsymbol{r})$ 构成了一个函数空间$\{f^l(\boldsymbol{r})\}$，这个函数空间构成了 $SO(3)$ 的一个不可约表示空间. 因为 $SO(3)$ 群算子 $\hat{P}(R)$ 与 Laplace 算子 ∇^2 交

换(这一点由无穷小算子 L_x, L_y, L_z 都与 ∇^2 交换可以得到证明), 因而若 $f^l(\boldsymbol{r})$ 为(11.3.56)式的解, 则 $\hat{P}(R)f^l(\boldsymbol{r})$ 也是(11.3.56)式的解, 因而由 Laplace 方程的 l 阶多项式 $f^l(\boldsymbol{r})$ 构成的空间 $\{f^l(\boldsymbol{r})\}$ 是 $SO(3)$ 群的不变空间.

下面令 Laplace 方程的 l 阶齐次多项式解为

$$f^l(\boldsymbol{r}) = \sum_{a,b} C_{ab}(x+\mathrm{i}y)^a(x-\mathrm{i}y)^b z^{l-a-b} \tag{11.3.57}$$

即

$$\begin{aligned}\nabla^2 f^l(\boldsymbol{r}) &= \sum_{a,b} C_{ab}[4ab(x+\mathrm{i}y)^{a-1}(x-\mathrm{i}y)^{b-1}z^{l-a-b} \\ &\quad + (l-a-b)(l-a-b-1)(x+\mathrm{i}y)^a(x-\mathrm{i}y)^b z^{l-a-b-2}] \\ &= 0\end{aligned} \tag{11.3.58}$$

(11.3.58)式给出了 $C_{a,b}$ 的递推公式, 对 $a-b=m$, $-l\leqslant m\leqslant l$, (11.3.58)式给出一组 $C_{a,b}$ 构成一个函数 $f^l(\boldsymbol{r})$, 因而可能的 m 共 $2l+1$ 个; 因而满足 Laplace 方程 l 阶齐次多项式构成 $2l+1$ 维的函数空间, 它给出了 $SO(3)$ 群的一个 $(2l+1)$ 维的不可约表示 $D^{(l)}$.

具体由(11.3.58)式解出以 $m=a-b$ 的全部 $C_{a,b}$, 便得到了 $f^l_m(\boldsymbol{r})$, 具体计算后可得到

$$f^l_m(\boldsymbol{r}) = r^l Y^l_m(\,,\theta,\varphi) \tag{11.3.59}$$

由(11.3.56)式看到 $SO(3)$ 群的基矢 $f^l_m(\boldsymbol{r})$ 与(11.3.10)式定义的 $SU(2)$ 群不可约基矢在结构上十分相似, 因而在这种结构相似的基矢上, 得到共同的表示矩阵就不奇怪了. 当然, 这种结构相似只是一种形象的说明, 本质上还在于两个群的两种基矢对无穷小算子和 Casimir 算子有相同的代数结构, 因而才有相同的表示矩阵.

11.3.4 $SU(2)$ 和 $SO(3)$ 群的表示矩阵 $D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的性质与特征标

1. $D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的性质

由于 $D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 是酉矩阵, 因而

$$D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)^{-1} = D^{(j)}(-\gamma,-\beta,-\alpha) = D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)^{+}$$

或写为矩阵元形式,

$$\begin{aligned}D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)^{-1}_{m'm} &= D^{(j)}(-\gamma,-\beta,-\alpha)_{m'm} \\ &= D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)^{*}_{m'm}\end{aligned} \tag{11.3.60}$$

而且

$$\begin{cases}\sum_{m'} D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)^{*}_{m'm}D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m'm''} = \delta_{mm''} \\ \sum_{m} D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m'm}D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)^{*}_{m''m} = \delta_{m'm''}\end{cases} \tag{11.3.61}$$

另一方面由(11.3.34)式可看出

$$\begin{aligned}(-1)^{2j}D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma) &= D^{(j)}(\alpha+2\pi,\beta,\gamma) = D^{(j)}(\alpha,\beta+2\pi,\gamma) \\ &= D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma+2\pi)\end{aligned} \tag{11.3.62}$$

注意 $2j$ 与 $2m$ 或 $2m'$ 有相同的奇偶性.

(2) $D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 满足如下的偏微分方程, 即

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}+\cot\beta\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}+\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}-2\cos\beta\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma}\right)\right]D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m'm}$$
$$=j(j+1)D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) \tag{11.3.63}$$

(11.3.63)的证明可由

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}e^{-i\gamma J_z} \tag{11.3.64}$$

入手. 容易得到

$$\begin{cases}\dfrac{\partial R(\alpha,\beta,\gamma)}{\partial\alpha}=iJ_zR(\alpha,\beta,\gamma)\\ \dfrac{\partial R(\alpha,\beta,\gamma)}{\partial\gamma}=iR(\alpha,\beta,\gamma)J_z\\ \dfrac{\partial R(\alpha,\beta,\gamma)}{\partial\beta}=e^{-i\alpha J_z}(-i)J_ye^{-i\beta J_y}e^{-i\gamma J_z}\end{cases} \tag{11.3.65}$$

由交换关系

$$[J_x,J_y]=iJ_z,\quad [J_y,J_z]=iJ_x,\quad [J_z,J_x]=iJ_y$$

并利用指数展开式

$$e^{-i\hat{A}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-i\hat{A})^n \tag{11.3.66}$$

可得到

$$\begin{cases}\dfrac{\partial R(\alpha,\beta,\gamma)}{\partial\beta}=-i(-\sin\alpha J_x+\cos\alpha J_z)R(\alpha,\beta,\gamma)\\ \dfrac{\partial R(\alpha,\beta,\gamma)}{\partial\gamma}=-i(\cos\alpha\sin\beta J_x+\sin\alpha\sin\beta J_y+\cos\beta J_z)R(\alpha,\beta,\gamma)\\ \dfrac{\partial R(\alpha,\beta,\gamma)}{\partial\alpha}=-iJ_zR(\alpha,\beta,\gamma)\end{cases} \tag{11.3.67}$$

整理后可得到

$$J_zR(\alpha,\beta,\gamma)=-i\frac{\partial}{\partial\alpha}R(\alpha,\beta,\gamma)$$
$$J_xR(\alpha,\beta,\gamma)=-i\left(\cos\alpha\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}-\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\cos\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)R(\alpha,\beta,\gamma)$$
$$J_yR(\alpha,\beta,\gamma)=-i\left(\sin\alpha\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}+\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)R(\alpha,\beta,\gamma)$$

由此得到

$$J^2R(\alpha,\beta,\gamma)=(J_x^2+J_y^2+J_z^2)R(\alpha,\beta,\gamma)$$
$$=-\left[\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}+\cot\beta\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{1}{\sin\beta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}+\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}-2\cos\beta\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma}\right)\right]R(\alpha,\beta,\gamma) \tag{11.3.68}$$

由于

$$D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m'm}=\langle jm'|R(\alpha,\beta,\gamma)|jm\rangle$$

由(11.3.68)式立即可得到(11.3.63)式.

这个方程在描述分子转动时十分有用.

2. $SO(3)$, $SU(2)$表示的特征标

1° SO(3)群和SU(2)群元素的类

用绕转轴方向 $\boldsymbol{n}$ 和转角 φ 表示的 $SO(3)$ 群元素 $R(\boldsymbol{n},\varphi)$，由(11.3.9)式为

$$R(\boldsymbol{n},\varphi)=\exp(-\mathrm{i}\varphi\boldsymbol{nL})$$

现在用转动矩阵

$$A=\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}\\a_{21}&a_{22}&a_{23}\\a_{31}&a_{32}&a_{33}\end{pmatrix},\quad \tilde{A}=A^{-1},\ \det A=1$$

作用 $R(\boldsymbol{n},\varphi)$，得到

$$AR(\boldsymbol{n},\varphi)A^{-1}=\exp(-\mathrm{i}\varphi A\boldsymbol{nL}A^{-1})$$

利用(11.2.6)式容易得到

$$A\boldsymbol{nL}A^{-1}=A\begin{pmatrix}0&-\varphi n_z&\varphi n_y\\\varphi n_z&0&-\varphi n_x\\-\varphi n_y&\varphi n_x&0\end{pmatrix}\tilde{A}=\begin{pmatrix}0&-\varphi n_z'&\varphi n_y'\\\varphi n_z'&0&-\varphi n_x'\\-\varphi n_y'&\varphi n_x&0\end{pmatrix}$$

其中

$$\boldsymbol{n}=A\boldsymbol{n}\quad 或\quad \begin{pmatrix}n_x'\\n_y'\\n_z'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}\\a_{21}&a_{22}&a_{23}\\a_{31}&a_{32}&a_{33}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}n_x\\n_y\\n_z\end{pmatrix}$$

这便证明了 $SO(3)$ 群中绕任何轴转相同角的元素相互共轭构成一个类.

对于 $SU(2)$ 群由(11.2.4′)式也可证明同样的结论，(11.2.4′)表示的 $SU(2)$ 的元素，对各种方向矢量 $\boldsymbol{n}=(n_x,n_y,n_z)$ 只要有相同的 r 的元素就是同一类.

2° $SO(3)$ 群和 $SU(2)$ 群的特征标

群 $SU(2)$ 不可约表示(j)的特征标为

$$\mathrm{tr}D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)=\sum_m D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{mm}=\chi^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)\qquad(11.3.69)$$

由于特征标是类的函数，因而取$(\alpha,\beta,\gamma)=(\alpha,0,0)$，即绕 z 轴转 α 角的元素的特征标为

$$\chi^{(j)}(\alpha)=\sum_{m=-j}^{j}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\alpha}=\frac{\sin(j+\frac{1}{2})\alpha}{\sin\alpha/2}\qquad(11.3.69')$$

即 $SU(2)$ 群不可约表示 j 的特征标，对于 $SO(3)$ 群，当 $j=l$ 为整数时，

$$\chi^{(j)}(\alpha)=\chi^{(l)}(\alpha\pm2\pi)$$

为单值表示的特征标. 当 $j=$ 半整数时，

$$\chi^{(l)}(\alpha)=\chi^{(j)}(\alpha\pm4\pi),\quad \chi^{(j)}(\alpha)=-\chi^{(j)}(\alpha\pm2\pi)$$

为双值表示的特征标.

11.3.5 $SU(2)$ 和 $SO(3)$ 群的上积分和不可约表示的广义正交定理

1. $SU(2)$ 群和 $SO(3)$ 的密度函数与群上积分

在 10.2 节中已在原则上讨论了 Lie 群群函数的积分，为了进行群函数的积分(或称群上积分)，首先须求出群的密度 $\rho(\alpha)$(或称权函数)，只有当左测度与右测度相等时，才存在统一的密度函数. 在这种情况下，群上积分存在. 对于紧致 Lie 群都满足这种条件，可以讨论它们的群上积分.

有限群 G 情况下的群函数 $f(g)$ 对群元素求和，在连续群下变为积分，即

$$\frac{1}{n_G}\sum_{g\in G}f(g) \to \int_{V_G} f(g)\mathrm{d}g = \int_{V_G} f(g(\boldsymbol{\alpha}))\rho(\boldsymbol{\alpha})\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha} \tag{11.3.70}$$

$\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}$ 为参数空间的体积无，$\rho(\boldsymbol{\alpha})$ 为 $\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}$ 内的群元素 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 的密度函数，当 $f(g)=1$ 时，

$$\frac{1}{n_G}\sum_{g} = 1, \qquad \int_{V_G}\rho(\boldsymbol{\alpha})\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha} = 1 \tag{11.3.71}$$

10.2 节已给出 $\boldsymbol{\alpha}$ 点的密度函数

$$\rho(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{J(\boldsymbol{\alpha})}\rho(\boldsymbol{\alpha}_0) \tag{11.3.72}$$

$\rho(\boldsymbol{\alpha}_0)$ 为原点处密度，$J(\boldsymbol{\alpha})$ 为 Jacobi 行列式.

按定义

$$J(\beta) = \begin{vmatrix} \left.\dfrac{\partial f_1(\beta,\alpha)}{\partial \alpha_1}\right|_{\alpha=0} & \cdots & \left.\dfrac{\partial f_r(\beta,\alpha)}{\partial \alpha_1}\right|_{\alpha=0} \\ \vdots & & \vdots \\ \left.\dfrac{\partial f_1(\beta,\alpha)}{\partial \alpha_r}\right|_{\alpha=0} & \cdots & \left.\dfrac{\partial f_r(\beta,\alpha)}{\partial \alpha_r}\right|_{\alpha=0} \end{vmatrix}.$$

对于 $SU(2)$ 群利用(11.2.4′)式给出的群元素

$$\boldsymbol{U}(\omega) = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\omega}{2} + \mathrm{i}\cos\theta\sin\dfrac{\omega}{2} & -\mathrm{i}\sin\theta\cos\varphi\sin\dfrac{\omega}{2} + \sin\theta\sin\varphi\sin\dfrac{\omega}{2} \\ -\mathrm{i}\sin\theta\cos\varphi\sin\dfrac{\omega}{2} - \sin\theta\sin\varphi\sin\dfrac{\omega}{2} & \cos\dfrac{\omega}{2} - \mathrm{i}\cos\theta\sin\dfrac{\omega}{2} \end{pmatrix}$$

$n_z=\cos\theta$, $n_x=\sin\theta\cos\varphi$, $n_y=\sin\theta\sin\varphi$ 是方向 $\boldsymbol{n}$ 的分量，按定义可求出 Jacobi 行列式为

$$J(\omega) = \begin{vmatrix} \dfrac{\omega}{2}\cot\dfrac{\omega}{2} & \dfrac{\omega}{2} & 0 \\ -\dfrac{\omega}{2} & \dfrac{\omega}{2}\cot\dfrac{\omega}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{\omega^2}{2\sin^2\dfrac{\omega}{2}} \tag{11.3.73}$$

但是一般群元素都用 Euler 角 (α,β,γ) 表示，为了计算上方便，需要 Euler 角表示的 Jacobi 行列式. 利用

$$U(\alpha,\beta,\gamma) = U(\boldsymbol{i}_z\alpha)U(\boldsymbol{i}_y\beta)U(\boldsymbol{i}_z\gamma)$$

通过很复杂的计算可得到

$$J(\alpha,\beta,\gamma) = \sin\beta \tag{11.3.74}$$

因而$SU(2)$群的群积分为

$$\rho(0)\int_{-2\pi}^{2\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{2\pi}\sin\beta\mathrm{d}\beta\int_{-2\pi}^{2\pi}\mathrm{d}\gamma=2\rho(0)\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta\mathrm{d}\beta\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\gamma$$
$$=2\rho(0)8\pi^2=1$$

因而$\rho(0)=\frac{1}{16\pi^2}$(注意$SU(2)$的定义域是半径为$2\pi$的球)，对于$SO(3)$群，因为它的定义域是半径为$\pi$的球，$\rho(0)=\frac{1}{8\pi^2}$.

2. *SU*(2)和*SO*(3)群的广义正交定理

对于$SU(2)$群不可约表示矩阵$D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$的广义正交定理为

$$\frac{1}{16\pi^2}\int_{-2\pi}^{2\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\mathrm{d}\beta\sin\beta\int_{-2\pi}^{2\pi}\mathrm{d}\gamma D^{(i)}(\alpha,\beta,\gamma)_{\mu\rho}^{*}D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{\nu\lambda}$$
$$=\frac{1}{2j+1}\delta_{ij}\delta_{\mu\nu}\delta_{\lambda\rho}\qquad(11.3.75)$$

代入(11.3.55)式，上式变为

$$\frac{1}{2}\int_0^{\pi}\mathrm{d}\beta\sin\beta d^{(i)}(\beta)_{\mu\nu}d^{(j)}(\beta)_{\mu\nu}=\delta_{ij}\frac{1}{2j+1}\qquad(11.3.76)$$

对于$SO(3)$群，不可约表示的广义正交定理为

$$\frac{1}{8\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\mathrm{d}\beta\sin\beta\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\gamma D^{(i)}(\alpha,\beta,\gamma)_{\mu\rho}^{*}D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{\nu\lambda}$$
$$=\frac{1}{2j+1}\delta_{\mu\nu}\delta_{\rho\lambda}$$
$$=\frac{1}{2}\int_0^{\pi}\mathrm{d}\beta\sin\beta d^{(i)}(\beta)_{\mu\nu}d^{(j)}(\beta)_{\mu\nu}=\delta_{ij}\frac{1}{2j+1}\qquad(11.3.76')$$

与$SU(2)$群完全相同，(11.3.75)式的证明可参阅 Edmonds A. R 著“Angnlar Momentum in Quantum Mechonics”

3. 特征标正交定理

$SU(2)$群不可约表示(j)的特征标$\chi^{(j)}(\psi)$为

$$\chi^{(j)}(\psi)=\sum_{\mu}D^{(j)}(\psi,0,0)_{\mu\mu}$$

它是对(11.2.4′)式表示的参数下的$SU(2)$群元素

$$U(\boldsymbol{n},\psi)=\exp(-\mathrm{i}\psi\boldsymbol{nJ})\qquad(11.2.4')$$

所定义的. 因而这种参数的 Jacabi 行列式为(11.3.73)式给出的

$$J(\psi)=\frac{\psi^2}{4\sin^2\psi}=\frac{\psi^2}{2(1-\cos\psi)}$$

对于这种参数体积元为

$$\mathrm{d}U=\psi^2\mathrm{d}\psi\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

实际上是球坐标上的体积元，ψ相当于r，$\boldsymbol{n}(\theta,\varphi)=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$. 因而由表示矩阵的正交定理得到特征标的正交定理为：

$SU(2)$群：由不可约表示的正交定理(11.3.75)式得到

$$\frac{1}{16\pi^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\psi(1-\cos\varphi)\sum_{\mu\nu}D^{(i)*}(\varphi,0,0)D^{i}_{\nu\mu}(\varphi,0,0)_{\mu\mu}$$

$$=\frac{1}{2j+1}\sum_{\mu\nu}\delta_{ij}\delta_{\mu\nu}$$

即

$$\frac{1}{16\pi^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\psi\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi(1-\cos\varphi)\chi^{(j)*}(\varphi)\chi^{(i)}(\varphi)=\delta_{ij}$$

对 θ, φ 积分后得到 $SU(2)$群的特征标正交定理

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}(1-\cos\varphi)\chi^{(j)*}(\varphi)\chi^{(i)}(\varphi)d\varphi=\delta_{ij}\tag{11.3.77}$$

$SO(3)$群：$SO(3)$群由不可约表示广义正交定理出发，可得到 $SO(3)$群的特征标正交定理

$$\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}(1-\cos\varphi)\chi^{(j)*}(\varphi)\chi^{(i)}(\varphi)d\varphi=\delta_{ij}\tag{11.3.77'}$$

容易证明(11.3.69)式与(11.3.69′)式是一致的.

11.3.6　$SU(2)$群有限维不可约表示的完备性

定理 11.3.1　$SU(2)$群除了以最高权 $j=0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ \cdots$标记的有限维不可约酉表示 $D^{(j)}$之外，不存在其它形式的有限维酉表示.

这个定理说明对于 $SU(2)$群最高权为正整数和半整数的不可约表示是完备的.

证明　下面用反证法证明这个定理，如果 $SU(2)$群除 $j=0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \cdots$的不可约表示外，还存在其它不可约表示，它的特征标为 $\chi(\varphi)$，由特征标正交定理(11.3.77)式得到

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}(1-\cos\varphi)\chi^{(j)*}(\varphi)\chi(\varphi)=0,\quad \text{对任意整数和半整数的} j$$

代入 $\chi^{(i)}(\varphi)$的表达式，上式为

$$\frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi}\sin(j+\frac{1}{2})\varphi\chi(\varphi)\mathrm{d}(\varphi)=0$$

但是在 $0\leqslant\varphi\leqslant2\pi$ 之内，$\{\sin(j+\frac{1}{2})\varphi,\ j=0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ \cdots\}$构成函数空间的完备的正交基矢，因而不可能存在一个函数 $\chi(\varphi)$与所有基矢 $\sin(j+\frac{1}{2})\varphi$ 都正交，这便证明了这一定理.

11.3.7　$O(3)$群的不可约表示

三维正交群 $O(3)$是由全部 3×3 正交矩阵构成的群，即

$$O(3)=\{A\mid\tilde{A}A=\tilde{A}A=E_{3\times3}\}$$

它的 Lie 代数 $o(3)$与 $so(3)$相同. 由 $\tilde{A}A=E_{3\times3}$可得到

$$\det A = \pm 1$$

因而 $SO(3)$ 群是 $O(3)$ 的子群. $O(3)$ 群是非连通的, $\det A = 1$ 的子群 $SO(3)$ 在 $O(3)$ 群的一个包括单位元 E 的叶上, $O(3)$ 群中 $\det A = -1$ 的元素在另一叶上. $SO(3)$ 群是 $O(3)$ 群的不变子群, 因而 $SO(3)$ 群与 $O(3)$ 群的商群 $O(3)/I$ 同构, 即

$$O(3)/I \sim SO(3)$$

I 为空间反演群 $I = \{e, i\}$, $e = E_{3\times3}$, $i = -E_{3\times3}$, $E_{3\times3}$ 为 3×3 的单位矩阵. 于是 $O(3)$ 是 $SO(3)$ 与 I 的直积群

$$O(3) = SO(3) \otimes I$$

$O(3)$ 群的元素为

$$R(\alpha, \beta, \gamma)E_{3\times3} = R(\alpha, \beta, \gamma)$$
$$S(\alpha, \beta, \gamma) = R(\alpha, \beta, \gamma)(-E_{3\times3}) = -R(\alpha, \beta, \gamma)$$

空间反演群是二阶的 Abel 群, 它只有两个一维的不可约表示 g 和 u, 即

I	e	i
g	1	1
u	1	-1

根据直积群表示理论, 由于子群的不可约表示的直积是直积群的不可约表示, 可由 $SO(3)$ 群和 I 群的不可约表示得到 $O(3)$ 群的不可约表示. 以 $D_\lambda^{(j)}$ 标记 $O(3)$ 群的不可约表示

$$D_\lambda^{(j)}(R(\alpha, \beta, \gamma)P) = D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)D^{(\lambda)}(P)$$

其中 p 为 I 的元素 $p = e$ 或 i, $D^{(\lambda)}(p)$ 为 I 群的不可约表示矩阵, $\lambda = g, u$, 即

$$D^{(g)}(e) = D^{(g)}(i) = 1, \quad D^{(u)}(e) = -D^{(u)}(i) = 1$$

因而 $O(3)$ 群的不可约表示为

$$D_g^{(j)}(R(\alpha, \beta, \gamma)P) = D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$$

或

$$\left.\begin{array}{l} D_g^{(j)}(R(\alpha, \beta, \gamma)P) = D_g^{(j)}(R(\alpha, \beta, \gamma)) \\ D_g^{(j)}(R(\alpha, \beta, \gamma)i) = D_g^{(j)}(-R(\alpha, \beta, \gamma)) \end{array}\right\} = D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \tag{11.3.78}$$

而不可约表示 $D_u^{(j)}$ 则为

$$\begin{cases} D_u^{(j)}(R(\alpha, \beta, \gamma)e) = D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \\ D_u^{(j)}(R(\alpha, \beta, \gamma)i) = -D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \end{cases} \tag{11.3.78'}$$

显然 $O(3)$ 群不可约表示满足与 $SO(3)$ 群相同的广义正交定理.

11.4 $SU(2)$ 群的 Clebsch-Gordan 系数、耦合基矢和 Racah 系数

由于 $SU(2)$ 群 j 为整数的不可约表示 $D^{(j)}$ 是 $SO(3)$ 群的单值表示, j 为半整数的不可

约表示 $D^{(j)}$ 是 $SO(3)$ 群的双值表示，因而在本节中只统一地讨论 $SU(2)$ 群的直积表示的不可约表示分解和相应的 Clebsch-Gordon 系数（简称 C-G 系数），所有结果对 $SO(3)$ 群全部适用.

11.4.1　$SU(2)$ 群直积表示的不可约表示分解与 Clebsch-Gordan 系数

1. 直积表示的不可约表示分解

$SU(2)$ 群不可约表示 $D^{(j_1)}$ 与 $D^{(j_2)}$ 的直积表示为

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = D^{(j_1 \otimes j_2)} \tag{11.4.1}$$

D 的特征标为

$$\begin{aligned}\chi^{(j_1\otimes j_2)}(\varphi) &= \chi^{(j_1)}(\varphi)\chi^{(j_2)}(\varphi) = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} e^{im_1\varphi} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} e^{im_2\varphi} \\ &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2} e^{i(m_1+m_2)\varphi}\end{aligned} \tag{11.4.2}$$

(11.4.2)式中 m_1+m_2 的最大值为 j_1+j_2，最小值为 $-j_1-j_2$，令 $m_1+m_2=m$，于是(11.4.2)式可表示为

$$\begin{aligned}\chi^{(j_1\otimes j_2)}(\varphi) &= \chi^{(j_1)}(\varphi)\chi^{(j_2)}(\varphi) \\ &= \sum_{m=-j_1-j_2}^{j_1+j_2} e^{im\varphi} + \sum_{m=-(j_1+j_2-1)}^{j_1+j_2-1} e^{im\varphi} + \cdots + \sum_{m=|j_1-j_2|}^{|j_1-j_2|} e^{im\varphi} \\ &= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \oplus \chi^{(j)}(\varphi)\end{aligned} \tag{11.4.3}$$

公式(11.4.3)给出了不可约表示直和的分解公式，即

$$\begin{cases} D^{(j_1\times j_2)} = D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \sum_j \oplus a_{j_1j_2;j} D^{(j)} \\ a_{j_1,j_2;j} = \begin{cases}1, & j = |j_1-j_2|, |j_1-j_2|+1, \cdots, j_1+j_2 \\ 0, & j \text{ 为其它值}\end{cases}\end{cases} \tag{11.4.4}$$

直积表示的矩阵 $D^{(j_1)}\otimes D^{(j_2)}$ 为 $(2_{j_1}+1)(2_{j_2}+1)\times(2_{j_1}+1)(2_{j_2}+1)$ 的矩阵，它的矩阵元为

$$D^{(j_1)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m_1m_1'} D^{(j_2)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m_2m_2'} = D^{j_1\otimes j_2}(\alpha,\beta,\gamma)_{m_1m_2;\, m_1'm_2'} \tag{11.4.5}$$

(m_1m_2) 和 $(m_1'm_2')$ 各有 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 种取值. (11.4.4)式说明 $D^{(j_1)}\otimes D^{(j_2)}$ 可约化为 $2j_0+1$ 个准对角矩阵直和的形式，这里 j_0 是 j_1 和 j_2 中较小的数值. 令这个准对角矩阵为

$$Q = D^{(|j_1-j_2|)} \oplus D^{|j_1-j_2|+1} \oplus \cdots \oplus D^{(j_1+j_2)}$$

$$= \begin{pmatrix} D^{(|j_1-j_2|)} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & D^{|j_1-j_2|+1} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & D^{(j_1+j_2)} \end{pmatrix} \tag{11.4.6}$$

由于

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}(2j+1)=(2j_1+1)(2j_2+1)$$

因而 Q 也是 $(2j_1+1)(2j_2+1)\times(2j_1+1)(2j_2+1)$ 的矩阵，它的矩阵元用 j 标记列，m 标记行，$j=|j_1-j_2|, |j_1-j_2|+1, \cdots, j_1+j_2$，$m=-j, -j+1, \cdots, j$，于是 $Q(\alpha, \beta, \gamma)$ 的矩阵元为

$$Q(\alpha,\beta,\gamma)_{j'm',jm}=\delta_{jj'}D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m'm} \tag{11.4.7}$$

2. C-G 级数与 C-G 系数

由于 $D^{(j_1)}\otimes D^{(j_2)}$ 是酉矩阵，因而存在 $(2j_1+1)(2j_2+1)\times(2j_1+1)(2j_2+1)$ 的酉矩阵 C 把矩阵 $D^{(j_1)}\otimes D^{(j_2)}$ 约化为矩阵 Q，即

$$CD^{(j_1)}(\alpha,\beta,\gamma)\otimes D^{(j_2)}(\alpha,\beta,\gamma)C^+=Q(\alpha,\beta,\gamma)=\sum_{j=(j_1-j_2)}^{j_1+j_2}\oplus D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma) \tag{11.4.8}$$

或

$$D^{(j_1)}(\alpha,\beta,\gamma)\otimes D^{(j_2)}(\alpha,\beta,\gamma)=C^+Q(\alpha,\beta,\gamma)C \tag{11.4.8'}$$

称(11.4.8)和(11.4.8′)式为 C-G 级数. 它表示直积表示向不可约表示的约化，变换矩阵 C 的矩阵元 $C^{j_1j_2}_{jm,\,m_1m_2}$，于是 C-G 级数的矩阵元公式为

$$\begin{aligned}
&[D^{(j_1)}(\alpha,\beta,\gamma)\otimes D^{(j_2)}(\alpha,\beta,\gamma)]_{m_1'm_2';\,m_1m_2}\\
&=D^{(j_1)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m_1',\,m_1}D^{(j_2)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m_2',\,m_2}\\
&=\sum_{jm}\sum_{j'm'}C^{j_1j_2+}_{jm,\,m_1'm_2'}Q(\alpha,\beta,\gamma)_{jm,\,j'm'}C^{j_1j_2}_{j'm',\,m_1m_2}\\
&=\sum_{j}\sum_{mm'}C^{j_1j_2+}_{jm',\,m_1'm_2'}D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m'm}C^{j_1j_2}_{jm,\,m_1m_2}
\end{aligned} \tag{11.4.9}$$

称 C 的矩阵元 $C^{j_1j_2}_{jm,\,m_1m_2}$ 为 C-G 系数，一般简称 C-G 系数，$C^{j_1j_2}_{jm,\,m_1m_2}$ 通常写为 $(j_1j_2,\,m_1m_2|jm)$.

3. C-G 系数的计算

1° 确定 $(j_1j_2,\,m_1m_2|jm)$ 中 m 的取值

为了确定 $(j_1j_2,\,m_1m_2|jm)$ 中的数值，在(11.4.9)式中取 $\alpha\neq0$，$\beta=\gamma=0$ 的表示矩阵. 由(11.3.34)式看到

$$d^{(j)}_{mm'}(\beta)=\delta_{mm'}$$

因而(11.4.9)式为

$$\begin{aligned}
&D^{(j_1)}(\alpha,0,0)_{m_1',\,m_1}D^{(j_2)}(\alpha,0,0)_{m_2',\,m_2}\\
&=e^{i(m_1'+m_2')}\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}\\
&=\sum_{j}\sum_{mm'}(jm'\mid j_1j_2,\,m_1'm_2)^*e^{im\alpha}\delta_{mm'}(j_1j_2,\,m_1m_2\mid jm)\\
&=\sum_{j}\sum_{m}(jm\mid j_1j_2,\,m_1'm_2')^*e^{im\alpha}(j_1j_2,\,m_1m_2\mid jm)
\end{aligned}$$

即

$$e^{i(m_1+m_2)\alpha} = \sum_{jm} |(j_1j_2, m_1m_2 | jm)|^2 e^{im\alpha} \tag{11.4.10}$$

因为在$[0, 2\pi]$的定义域中，$e^{im\alpha}$是完备的集合，因而只能是

$$(j_1j_2, m_1m_2|jm) = \delta_{m, m_1+m_2}(j_1j_2, m_1m_2|jm) \tag{11.4.11}$$

这样连同$j = |j_1 - j_2|$, $|j_1 - j_2| + 1$, $\cdots$, $j_1 + j_2$ 就得到了$(j_1j_2, m_1m_2|jm)$的两个非零条件

$$\left.\begin{array}{l} m_1 + m_2 = m \\ j, j_1, j_2 \text{ 满足三角形条件} \triangle(j_1j_2j) \end{array}\right\} \tag{11.4.12}$$

所谓三角形条件，就是以j_1, j_2, j 为边的三角形，任意两边之差一定小于或等于第三边，任意两边之和一定大于或等于第三边.

2° C-G 系数的相位规约和表达式

利用 $m = m_1 + m_2$ 的条件(11.4.8)式可写为

$$\begin{aligned} &D^{(j_1)}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_1', m_1} D^{(j_2)}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_2', m_2} \\ &= \sum_j (jm_1' + m_2', j_1j_2, m_1'm_2')^* \\ &\quad \cdot D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_1'+m_2', m_1+m_2}(j_1j_2, m_1m_2 | jm_1 + m_2) \end{aligned} \tag{11.4.13}$$

为了从此式求出 C-G 系数，用$D^{(j)*}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_1'+m_2', m_1+m_2}$乘(11.4.9)式两端，并取群元素积分，利用不可约表示正交定理得到

$$\begin{aligned} &\frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} \sin\beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma D^{(j')*}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_1'+m_2', m_1+m_2} \\ &D^{(j_1)}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_1'm_1} D^{(j_2)}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_2'm_2} \\ &= \sum_{jmm'} (jm_1' + m_2' | j_1j_2, m_1'm_2')^* \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} \sin\beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \\ &D^{(j')*}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_1'+m_2', m_1+m_2} D^{(j)*}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_1'm}(j_1j_2, m_1m_2 | jm) \\ &= \frac{1}{2j'+1}(j'm_1' + m_2' | j_1j_2, m_1'm'_2)^*(j_1j_2, m_1m_2 | j', m_1 + m_2) \end{aligned} \tag{11.4.14}$$

为了计算(11.4.14)式左端的积分，取一些特殊的 m_1' 和 m_2'，令 $m_1' = j_1$, $m_2' = -j_2$，于是(11.4.14)式变为

$$\begin{aligned} &\frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} \sin\beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma D^{(j)*}(\alpha, \beta, \gamma)_{j_1-j_2, m_1+m_2} \\ &D^{(j_1)}(\alpha, \beta, \gamma)_{j_1m_1} D^{(j_2)}(\alpha, \beta, \gamma)_{-j_2m_2} \\ &= \frac{1}{2j+1}(j, j_1 - j_2 | j_1j_2, j_1 - j_2)^*(j_1j_2, m_1m_2 | j, m_1 + m_2) \end{aligned} \tag{11.4.14'}$$

对于 $m_1' = j_1$, $m_2' = -j_2$，由(11.3.34)式可得到

$$\left\{\begin{array}{l} D^{(j_1)}(\alpha, \beta, \gamma)_{j_1m_1} = (-1)^{j_1-m_1}\left[\binom{2j_1}{m_1}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-ij_1\alpha}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{j_1+m_1}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{j_1-m_1} e^{-im_1\gamma} \\ D^{(j_2)}(\alpha, \beta, \gamma)_{-j_2m_2} = \left[\binom{2j_2}{m_2}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-ij_2\alpha}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{j_2-m_2}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{j_2+m_2} e^{-im_2\gamma} \end{array}\right.$$

(11.4.15)

把 $D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{j_1-j_2,\,m_1+m_2}$用(11.3.34)式表达，则上式为

$$\frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta\mathrm{d}\beta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\gamma$$

$$\cdot\left[\sum_k\frac{(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!(j+m_1+m_2)!(j-m_1-m_2)!}{k!(j-m_1-m_2-k)!(j+j_1-j_2-k)!(k-j_1+j_2+m_1+m2)!}\right]^{1/2}$$

$$\cdot\left[\binom{2j_1}{j_1+m_1}\binom{2j_2}{j_2+m_2}\right]^{1/2}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2(j+j_1-m_2-k)}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2(j_2+m_2+k)}$$

$$=\frac{1}{2j+1}(j,j_1-j_2\mid j_1j_2,j_1-j_2)^*(j_1j_2,m_1m_2\mid jm_1+m_2) \tag{11.4.16}$$

(11.4.10)式左端的积分为

$$\frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta\mathrm{d}\beta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\gamma\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2(j+j_1-m_2-k)}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2(j_2+m_2+k)}$$

$$=\frac{(j+j_1-m_2-k)!}{(j_1+j_2+j+1)!} \tag{11.4.17}$$

由此得到

$$(j,j_1-j_2\mid j_1j_2,j_1-j_2)^*(j_1j_2,m_1m_2\mid jm_1+m_2)$$

$$=\sum_k(-1)^{j_1-m_1+k}(2j+1)\sqrt{(2j_1)!(2j_2)!}$$

$$\cdot\left[\frac{(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!(j+m_1+m_2)!(j-m_1-m_2)!}{(j_1-m_1)!(j_2-m_1)!(j_2+m_1)!(j_2-m_1)!}\right]^{1/2}$$

$$\cdot\frac{(j+j_1-m_2-k)!(j_2+m_2+k)}{(j_1+j_2+j+1)!k!(j-m_1-m_2-k)!(j+j_1-j_2-k)!(k-j_1+j_2+m_1+m_2)!} \tag{11.4.18}$$

令 $m_1=j_1$，$m_2=-j_2$，则上式为

$$|(j_1j_2,j_1-j_2\mid j,j_1-j_2)|^2$$

$$=\frac{(2j+1)(j+j_1-j_2)!}{(j+j_1+j_2+1)!}\sum_k(-1)^k\binom{j-j_1+j_2}{k}\frac{(j+j_1+j_2-k)!}{(j+j_1-j_2-k)!} \tag{11.4.19}$$

利用恒等式

$$\sum_k(-1)^k\binom{j-j_1+j_2}{k}\frac{(j+j_1+j_2-k)!}{(j+j_1-j_2-k)!}=(2j_2)\binom{2j_1}{j+j_1-j_2} \tag{11.4.20}$$

可得到

$$|(j_1j_2,j_1-j_2\mid j,j_1-j_2|^2=\frac{(2j+1)(2j_1)!(2j_2)!}{(j+j_1+j_2+1)!(j_1+j_2-j)!} \tag{11.4.21}$$

按 Condon-shartley 相位规约，规定$(j_1j_1,j_2-j_2\mid j,j_1-j_2)$为正实数，即

$$(j_1j_2,j_1-j_2\mid j,j_1-j_2)=\left[\frac{(2j+1)(2j_1)!(2j_2)!}{(j+j_1+j_2+1)!(j_1+j_2-j)!}\right]^{1/2} \tag{11.4.22}$$

于是由(11.4.12)式就得到了 C-G 系数

$$
\begin{aligned}
&(j_1j_2,\ m_1m_2|jm)\\
&=\delta_{m,\,m_1+m_2}(-1)^{j_1-m_1}\left[\frac{(2j+1)(j+j_1-j_2)!\ (j-j_1+j_2)!\ (j_1+j_2-j)!\ (j+m)!\ (j-m)!}{(j+j_1+j_2+1)!\ (j_1+m_1)!\ (j_1-m_1)!\ (j_2+m_2)!\ (j_2-m_2)!}\right]^{1/2}\\
&\cdot\sum_k(-1)^{j_1-m_1+k}\frac{(j+j_1-m_2-k)!\ (j_2+m_2+k)!}{k!\ (j-m-k)!\ (j+j_1-j_2-k)!\ (k-j_1+j_2+m)!}
\end{aligned}
\tag{11.4.23}
$$

由此式可看到在相位规约(11.4.16)式下，C-G 系数是实数.

对(11.4.17)式的积分和恒等式(11.4.20)的证明有兴趣的读者可参阅韩其智、孙洪洲著《群论》.

4. C-G 系数的正交性

由 C-G 系数为矩阵元的矩阵 C 是酉矩阵，而在 Conton-shortley 相位规约下 C 为实矩阵. 因而 C 是实正交矩阵，它的矩阵元——C-G 系数当然满足如下的正交归一化条件，即

$$
\begin{cases}
\sum\limits_{m_1m_2}(j_1j_2,\ m_1m_2\mid jm)(j_1j_2,\ m_1m_2\mid j'm')=\delta_{jj'}\delta_{mm'}\\
\sum\limits_{jm}(j_1j_2,\ m_1m_2\mid jm)(j_1j_2,\ m_1'm_2'\mid jm)=\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}
\end{cases}
\tag{11.4.24}
$$

11.4.2　角动量的耦合与耦合基矢

1. $SU(2)$群的直积空间与耦合空间、耦合角动量

如果存在两个相互无关的满足交换关系(11.1.2)的算子$(J_{1x},\ J_{1y},\ J_{1z})$和$(J_{2x},\ J_{2y},\ J_{2z})$，以它们为无穷小算子分别构成 $SU_1(2)$和 $SU_2(2)$群，由它们可构成直积群 $SU_1(2)\otimes SU_2(2)$. 直积群的元素为

$$
\begin{aligned}
&\sigma_1(\alpha_1,\ \beta_1,\ \gamma_1)\sigma_2(\alpha_2,\ \beta_2,\ \gamma_2)\\
&=\sigma(\alpha_1,\ \beta_1,\ \gamma_1;\ \alpha_2,\ \beta_2,\ \gamma_2)\\
&=e^{-i\alpha_1J_{1z}}e^{-i\beta_1J_{1y}}e^{-i\gamma_1J_{1z}}e^{-i\alpha_2J_{2z}-i\beta_2J_{2y}-i\gamma_2J_{2z}}
\end{aligned}
$$

由于 $\boldsymbol{J}_1$，$\boldsymbol{J}_2$ 是相互无关的，因而它们彼此交换，上式可写为

$$
\sigma(\alpha_1,\ \beta_1,\ \gamma_1;\ \alpha_2,\ \beta_2,\ \gamma_2)=e^{-i(\alpha_1J_{1z}+\alpha_2J_{2z})}e^{-i(\beta_1J_{1y}+\beta_2J_{2y})}e^{-i(\gamma_1J_{1z}+\gamma_2J_{2z})}
$$

比如两个独立的电子体系的轨道角动量或者一个电子当忽略旋转作用时的轨道角动量与自旋角动量，就可由上述直积群描述.

上节所讨论的 $SU_1(2)$和 $SU_2(2)$的不可约表示 $D^{(j_1)}$和 $D^{(j_2)}$的直积

$$
D^{(j_1)}(\alpha_1,\ \beta_1,\ \gamma_1)\otimes D^{(j_2)}(\alpha_2,\ \beta_2,\ \gamma_2)
$$

为直积群 $SU_1(2)\otimes SU_2(2)$的不可约表示.

如果两个算子 $\boldsymbol{J}_1$，$\boldsymbol{J}_2$ 之间存在相互作用，从而使得它们不能在 $SU_1(2)$和 $SU_2(2)$的群空间中独立转动，只能束缚在一起转动，即 $\alpha_1=\alpha_2$，$\beta_1=\beta_2$，$\gamma_1=\gamma_2$. 于是

$$
\begin{aligned}
\sigma(\alpha_1,\ \beta_1,\ \gamma_1;\ \alpha_1,\ \beta_1,\ \gamma_1)&=\sigma(\alpha,\ \beta,\ \gamma)\\
&=e^{-i\alpha(J_{1z}+J_{2z})}e^{-i\beta(J_{1y}+J_{2y})}e^{-i\gamma(J_{1z}+J_{2z})}
\end{aligned}
\tag{11.4.25}
$$

容易看到算子 $J_{1x}+J_{2x}=J_x$，$J_{1y}+J_{2y}=J_y$，$J_{1z}+J_{2z}=J_z$也满足交换关系(11.1.2)，因而由它们也构成 $SU(2)$群，这个群为耦合空间的 $SU(2)$群. 群元素由(11.4.25)式描述. 显然

$$SU_1(2)\otimes SU_2(2)\supset SU(2)$$

称角动量算子

$$J_x=J_{1x}+J_{2x},\ J_y=J_{1y}+J_{2y},\ J_z=J_{1z}+J_{2z} \tag{11.4.26}$$

为耦合角动量算子，或总角动量算子. 直积表示 $D^{(j_1)}(\alpha,\beta,\gamma)\otimes D^{(j_2)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 为群 $SU(2)$ 的可约表示.

这样 Clebsch-Gordan 级数(11.4.14)式的意义就明确了，它表示把两个角动量分别为 j_1 和 j_2 的不可约表示的直积约化为总角动量为 j 的不可约表示的直和.

2. 耦合基矢与 Racah 系数

算子 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 的基矢分别为 $|j_1m_1\rangle$，$|j_2m_2\rangle$，而且

$$J_{1z}|j_1m_1\rangle = m_1|j_1m_1\rangle$$

$$J_{2z}|j_2m_2\rangle = m_2|j_2m_2\rangle$$

$$J_{1z}j_{1\pm}|j_1m_1\rangle = (m_1\pm1)j_{1\pm}|j_1m_1\rangle$$

$$J_{2z}j_{2\pm}|j_2m_2\rangle = (m_2\pm1)j_{2\pm}|j_2m_2\rangle$$

定义耦合空间总角动量算子 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$ 的基矢为 $|(j_1j_2),jm\rangle$，而且

$$\begin{cases} J_z|(j_1j_2)jm\rangle = m|(j_1j_2)jm\rangle \\ J_\pm|(j_1j_2)jm\rangle = [(j\mp m)(j\pm m+1)]^{\frac{1}{2}}|(j_1j_2)jm\pm1\rangle \end{cases} \tag{11.4.27}$$

矩阵 $D^{(j_1)}(\alpha,\beta,\gamma)\otimes D^{(j_2)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 实际是以基矢的直积 $\{|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle=|j_1m_1,j_2m_2\rangle\}$ 为基矢的矩阵元，即

$$[D^{(j_1)}(\alpha,\beta,\gamma)\otimes D^{(j_2)}(\alpha,\beta,\gamma)]_{m_1'm_2'}$$

$$=\langle j_1m_1',j_2m_2'|\sigma(\alpha,\beta,\gamma)|j_1m_1,j_2m_2\rangle$$

耦合矩阵元可写为耦合基矢 $|(j_1j_2)jm\rangle$ 的矩阵元，即

$$\langle(j_1j_2)m'|\sigma(\alpha,\beta,\gamma)|(j_1j_2)jm\rangle=D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m'm}$$

于是 Clebsch-Gordan 级数(11.4.8)式可写为

$$\langle j_1m_1',j_2m_2'|\sigma(\alpha,\beta,\gamma)|j_1m_1,j_2m_2\rangle$$

$$=\sum_j\sum_{m,m'}(jm'|j_1j_2,m_1'm'_2)\langle(j_1j_2)jm'|\sigma(\alpha,\beta,\gamma)|(j_1j_2)jm\rangle(j_1j_2',m_1m_2|jm) \tag{11.4.27}$$

利用 C-G 系数的正交归一性(11.4.26)式，在(11.4.27)式两端分别乘以 $(j_1j_2,m_1m_2|j'm'')$ 和 $(j'm''|j_1j_2,m_1'm_2')$ 并对 $m_1m_2m_1'm_2'$ 求和，利用 C-G 系数的正交性可得到

$$\sum_{m_1m_2}\sum_{m_1'm_2'}(j_1j_2,m_1m_2|j'm'')\langle j_1m_1',j_2m_2'|\sigma(\alpha,\beta,\gamma)|j_1m_1,j_2m_2\rangle(j'm''|j_1j_2,m_1'm_2')$$

$$=\sum_{jmm'}\sum_{m_1m_1'm_2m_2'}(j_1j_2,m_1m_2|j'm'')(j_1j_2,m_1'm_2'|jm')$$

$$\cdot\langle(j_1j_2)jm'|\sigma(\alpha,\beta,\gamma)|(j_1j_2)jm\rangle(jm'|j_1j_2,m_1m_2)(j'm''|j_1j_2,m_1'm_2')$$

$$=\sum_{jmm'}\delta_{jj'}\delta_{m'm''}\delta_{mm''}\langle(j_1j_2)jm'|\sigma(\alpha,\beta,\gamma)|(j_1j_2)jm\rangle$$

$$=\langle(j_1j_2)j'm'''|\sigma(\alpha,\beta,\gamma)|(j_1j_2)j'm''\rangle \tag{11.4.28}$$

由此得到耦合基矢

$$|(j_1j_2)jm\rangle = \sum_{m_1m_2}(j_1j_2,\ m_1m_2\,|\,jm)\,|\,j_1m_1,\ j_2m_2\rangle \tag{11.4.29}$$

这表明通过 C-G 系数可把可约表示基矢 $\{|j_1m_1,\ j_2m_2\rangle\}$ 耦合为具有一定角动量 j（或者说最高权）的不可约表示的基矢，因而 C-G 系数也称为向量（基矢）耦合系数. (11.4.22) 式的逆变换为

$$|\,j_1m_1,\ j_2m_2\rangle = \sum_{jm}(jm\,|\,j_1j_2,\ m_1m_2)\,|\,(j_1j_2)jm\rangle \tag{11.4.30}$$

利用基矢 $|j_1m_1\rangle$ 和 $|j_2m_2\rangle$ 以及 $|(j_1j_2)jm\rangle$ 的正交归一性，由 (11.4.29) 式和 (11.4.30) 式得到 C-G 系数为

$$\begin{cases}(j_1j_2,\ m_1m_2\,|\,jm) = \langle j_1m_1,\ j_2m_2\,|\,(j_1j_2)jm\rangle \\ (j_1j_2,\ m_1m_2\,|\,jm) = \langle (j_1j_2)jm\,|\,j_1m_1,\ j_2m_2\rangle\end{cases} \tag{11.4.31}$$

即 C-G 系数为耦合基 $|(j_1j_2)jm\rangle$ 和由基矢简单积构成的基 $|j_1m_1,\ j_2m_2\rangle = |j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$ 的内积.

(11.4.29) 式给出的耦合基是满足条件 (11.4.27) 式的标准归一化基矢，对于 (11.4.29) 式第一个公式是可以简单证明的. 因为

$$\begin{aligned}&J_z\,|\,(j_1j_2)jm\rangle\\ &=\sum_{m_1m_2}(j_1j_2,\ m_1m_2\,|\,jm)[(J_{1z}\,|\,j_1m_1\rangle)\,|\,j_2m_2\rangle + |-j_1m_1\rangle J_{2z}\,|\,j_2m_2\rangle]\\ &=m\sum_{m_1m_2}(j_1j_2,\ m_1m_2\,|\,jm)\,|\,j_1m_1,\ j_2m_2\rangle\\ &=m\,|\,(j_1j_2)jm\rangle\end{aligned}$$

注意 $(j_1m_1,\ j_2m_2|jm)$ 的非零条件是 $m_1+m_2=m$.

对于 (11.4.29) 式的第二个公式

$$\begin{aligned}&J_\pm|\,(j_1j_2)jm\rangle\\ &=\sum_{m_1m_2}(j_1j_2,\ m_1m_2\,|\,jm)[(J_{1\pm}\,|\,j_1m_1\rangle)\,|\,j_2m_2\rangle + |\,j_1m_1\rangle J_{2\pm}\,|\,j_2m_2\rangle]\\ &=\sum_{m_1m_2}(j_1j_2,\ m_1m_2\,|\,jm)\{[(j_1\mp m_1)(j_1\pm m_1+1)]^{1/2}\,|\,j_1m_1\pm1\rangle\,|\,j_2m_2\rangle\\ &\qquad+[(j_2\mp m_2)(j_2\pm m_2+1)]^{1/2}\,|\,j_1m_1\rangle\,|\,j_2m_2\pm1\rangle\}\end{aligned}$$

以 $\langle(j_1j_2)jm\pm1|$ 作用上式得到

$$\begin{aligned}&\langle(j_1j_2)jm\pm1\,|\,J_\pm|\,(j_1j_2)jm\rangle\\ &=\sum_{m_1m_2}(j_1j_2,\ m_1m_2\,|\,jm)\{[(j_1\mp m_1)(j_1\pm m_1+1)]^{1/2}\langle(j_1j_2)jm\pm1\,|\,j_1m_1\pm1,\ j_2m_2\rangle\\ &\qquad+[(j_2\mp m_2)(j_2\pm m_2+1)]^{1/2}\langle(j_1j_2)jm\pm1\,|\,j_1m_1,\ j_2m_2\pm1\rangle\}\\ &=\sum_{m_1m_2}(j_1j_2,\ m_1m_2\,|\,jm)\{[(j_1\mp m_1)(j_1\pm m_1+1)]^{1/2}(j;\ m\pm1\,|\,j_1j_2,\ m_1\pm1,\ m_2)\\ &\qquad+[(j_2\mp m_2)(j_2\pm m_2+1)]^{1/2}(j,\ m\pm1\,|\,j_1j_2,\ m_1\pm1,\ m_2)\\ &\qquad\cdot[(j_2\mp m_2)(j_2\pm m_2+1)]^{1/2}(j,\ m\pm1\,|\,j,\ j_2,\ m_2\pm1)\}\end{aligned}$$

利用(11.4.23)C-G系数的表达式代入上式，经过繁杂的计算，可得到

$$\langle (j_1j_2)jm\pm1|J_\pm|(j_1j_2)jm\rangle=[(m\mp m)(j\pm m+1)]^{1/2}$$

即耦合基$|(j_1j_2)jm\rangle$满足(11.4.27)式.

如果从(11.4.27)式出发，可以得到C-G系数的递推公式，即

$$\begin{aligned}&[(j\mp m)(j\pm m+1)]^{1/2}|(j_1j_2)jm\pm1\rangle\\&=\sum_{m_1m_2}(j_1j_2,m_1m_2|jm)\{[(j_1\mp m_1)(j_1\pm m_1+1)]^{1/2}|j_1m_1\pm1\rangle|j_2m_2\rangle\\&\quad+[(j_2\mp m_2)(j_2\pm m_2+1)]^{1/2}|j_1m_1\rangle|j_2m_2\pm1\rangle\}\end{aligned}$$

两端乘以$\langle j_1m_1',j_2m_2'|$，得到

$$\begin{aligned}&[(j\mp m)(j\pm m+1)]^{1/2}(j_1j_2,m_1'm_2'|jm\pm1)\\&=\sum_{m_1m_2}(j_1j_2,m_1m_2|jm)\{[(j_1\mp m_1)(j_1\pm m_1+1)]^{1/2}\delta_{m_2'm_2}\delta_{m_1\pm1,m_1'}\\&\quad+[(j_2\mp m_2)(j_2\pm m_2+1)]^{1/2}\delta_{m_1'm_1}\delta_{m_2'm_2\pm1}\}\\&=(j_1j_2,m_1'\mp1,m_2'|jm)[(j_1\mp(m_1'\mp1))(j_1\pm(m_1'\mp1)+1)]^{1/2}\\&\quad+(j_1j_2,m_1'm_2'\mp1jm)[(j_2\mp(m_2'\mp1))(j_2\pm(m_2'\mp1)+1)]^{1/2}\end{aligned}$$

对J_+和J_-分别写出，便是$(j_1j_2,m_1m_2|jm)$的递推公式.

$$\begin{aligned}&[(j-m)(j+m+1)]^{1/2}|(j_1j_2,m_1m_2|jm+1)\\&=[(j_1-m_1+1)(j+m_1)]^{1/2}(j_1j_2,m_1-1,m_2|jm)\\&\qquad+[(j_2-m_2+1)(j_2+m_2)]^{1/2}(j_1j_2,m_1m_2-1|jm)\\&\qquad\cdot[(j+m)(j-m+1)]^{1/2}|(j_1j_2,m_1m_2|jm-1)\\&=[(j_1+m_1+1)(j_1-m_1)]^{1/2}(j_1j_2,(m_1+1)m_2|jm)\\&\qquad+[(j_2+m_2+1)(j_2-m_2)]^{1/2}(j_1j_2,m_1m_2+1|jm)\end{aligned}\tag{11.4.32}$$

当采取

$$(j_1j_2,-j_1-j_2|j_1+j_2,-j_1-j_2)=1$$

时由递推公式(11.4.32)所得的结果与(11.4.23)式计算的结果是完全一致的. 比如L. I. Schiff著"Quantum Mechanics"一书就使用了递推公式(11.4.32).

11.4.3 Clebsch-Gordan系数的对称性与3-j符号

(11.4.15)式表明C-G系数具有交换j_1，j_2的对称性，为了看到这一点，把(11.4.15)式写为

$$\begin{aligned}&(j_1j_2,m_1'm_2'|jm')(j_1j_2,m_1m_2|jm)\\&=\frac{2j+1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta\mathrm{d}\beta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\gamma D^{(j)*}(\alpha,\beta,\gamma)_{m'm}D^{(j_1)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m_1'm_1}D^{(j_2)}(\alpha,\beta,\gamma)_{m_2'm_2}\end{aligned}$$

当交换j_1j_2时上式并无变化，因而得到C-G系数对交换j_1j_2的对称性，即

$$\begin{cases}(j_1j_2,m_1m_2|jm)^2=(j_2j_1,m_2m_1|jm)^2\\(j_1j_2,m_1m_2|jm)=\pm(j_2j_1,m_2m_1|jm)\end{cases}\tag{11.4.33}$$

按一般相因子惯例取

$$(j_1j_2, m_1m_2|jm) = (-1)^{j_1+j_2+j}(j_2j_1, m_2m_1|jm) \tag{11.4.34}$$

但是 j_1, j_2 与 j 却没有很好的交换对称性，定义 Winger$V$-系数，为

$$V(j_1j_2j_3, m_1m_2m_3) = (-1)^{j_3-m_3}(2j+1)^{-\frac{1}{2}}(j_1j_2, m_1m_2|\bar{m}_3) \tag{11.4.35}$$

Wigner 进而引入“3-j”符号，即

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_3+j_2-j_1}V(j_1j_2j_3, m_1m_2m_3)\delta_{m_3, m_1+m_2} \tag{11.4.36}$$

3-j 符号与 C-G 系数的关系为

$$(j_1j_2, m_1m_2|jm) = (-1)^{j_1-j_2-m}\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & \bar{m} \end{pmatrix}$$

3-j 符号具有更好的对称性，由(11.4.14)式得到

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3' \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{8\pi^2}\int D^{(j_1)}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_1'm_1}D^{(j_2)}(\alpha, \beta, \gamma)_{m_2'm_2}D^{(j_3)}_{m_3'm_3}(\alpha, \beta, \gamma)\mathrm{d}\Omega$$

因而 3-j 符号具有 $j_1j_2j_3$ 的任意置换对称性，即

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{cases} (-1)^{j_1+j_2j_3}\begin{pmatrix} j_i & j_j & j_k \\ m_i & m_j & m_k \end{pmatrix}, & j_ij_jj_k \text{ 为 } j_1j_2j_3 \text{ 的奇置换} \\ \begin{pmatrix} j_i & j_j & j_k \\ m_i & m_j & m_k \end{pmatrix}, & j_ij_jj_k \text{ 为 } j_1j_2j_3 \text{ 的偶置换} \end{cases} \tag{11.4.37}$$

由表示矩阵性质

$$D^{(j)*}(\alpha, \beta, \gamma)_{m'm} = (-1)^{m-m'}D^{(2j)}(\alpha, \beta, \gamma)_{\bar{m}'\bar{m}}$$

还可得到 3-j 符号的另一性质

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \bar{m}_1 & \bar{m}_2 & \bar{m}_3 \end{pmatrix} \tag{11.4.38}$$

3-j 符号的正交归一性关系为

$$\begin{cases} \sum\limits_{m_1m_2}(2j_3+1)\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} = \delta_{j_3j_3'}\delta_{m_3m_3'} \\ \sum\limits_{j_3m_3}(2j_3+1)\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'} \end{cases} \tag{11.4.39}$$

3-j 符号的对称性为计算 C-G 系数带来很大方便.

在下面两个表中给出了常用的几个常用的 3-j 符号表达式.

$j_2=\frac{1}{2}$的 3-j 符号公式

$j_2=\frac{1}{2}$	$m_2=\frac{1}{2}$	$m_2=-\frac{1}{2}$
$j_3=j_1+\frac{1}{2}$	$\left[\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right]^{1/2}$
$j_3=j_1-\frac{1}{2}$	$-\left[\frac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right]^{1/2}$

$j_2=1$ 的 3-j 符号公式

$j_2=1$	$m_2=1$	$m_2=0$	$m_2=-1$
$j_3=j_1+1$	$\left[\frac{(j_1+m)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{2(j_1-m+1)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$
$j_3=j_1$	$\left[\frac{(j_1+m)(j_1-m+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{1/2}$	$-\frac{m}{[j_1(j_1+1)]^{1/2}}$	$-\left[\frac{(j_1-m)(j_1+m+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{1/2}$
$j_3=j_1-1$	$\left[\frac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{2j_1(2j_1+1)}\right]^{1/2}$	$-\left[\frac{(j_1-m)(j_1+m)}{j_1(2j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j_1+m+1)(j_1+m)}{2j_1(2j_1+1)}\right]^{1/2}$

11.4.4 Racah 系数与 6-j 符号、9-j 符号

1. 3 个角动量的耦合空间与耦合基矢

如果量子体系包括3个角动量$\boldsymbol{J}_1$, $\boldsymbol{J}_2$, $\boldsymbol{J}_3$，它们分别构成$SU_1(2)$, $SU_2(2)$和$SU_3(2)$群，直积空间为

$$SU_1(2)\otimes SU_2(2)\otimes SU_3(2)$$

当这 3 个角动量之间存在相互作用时，可合成一个总角动量.

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2+\boldsymbol{J}_3$$

这种耦合有两种方式，即

$$\begin{cases}\boldsymbol{J}=(\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2)+\boldsymbol{J}_3=\boldsymbol{J}_{12}+\boldsymbol{J}_3\\ \boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+(\boldsymbol{J}_2+\boldsymbol{J}_3)=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_{23}\end{cases}\tag{11.4.40}$$

总角动量$\boldsymbol{J}$生成$SU(2)$群，两个中间角动量分别生成$SU_{12}(2)$和$SU_{23}(2)$群，因而有两种群的分解链.

$$\begin{cases}SU_1(2)\otimes SU_2(2)\otimes SU_3(2)\supset SU_{12}(2)\otimes SU_3(2)\supset SU(2)\\ SU_1(2)\otimes SU_2(2)\otimes SU_3(2)\supset SU_1(2)\otimes SU_{23}(2)\supset SU(2)\end{cases}\tag{11.4.40'}$$

直积空间$SU_1(2)\otimes SU_2(2)\otimes SU_3(2)$的基矢为$|j_1m_1, j_2m_2, j_3m_3\rangle$.

$$|j_1m_1, j_2m_2, j_3m_3\rangle=|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle|j_3m_3\rangle$$

$SU(2)$空间的耦合基矢有两种构成方式，即

$$|((j_1j_2)j_{12}j_3)j, m\rangle \text{和} |(j_1(j_2j_3)j_{12})j, m\rangle$$

而

$$\begin{cases} |(j_1j_2)j_{12}, m_{12}\rangle = \sum_{m_1m_2}(j_1j_2, m_1m_2 | j_{12}m_{12}) | j_1m_1\rangle | j_2m_2\rangle \\ |(j_2j_3)j_{23}, m_{12}\rangle = \sum_{m_2m_3}(j_2j_3, m_2m_3 | j_{23}m_{23}) | j_2m_2\rangle | j_3m_3\rangle \end{cases} \tag{11.4.41}$$

由此可得到

$$\begin{aligned} &|((j_1j_2)j_{12}j_3)jm\rangle \\ &= \sum_{m_{12}m_3}(j_{12}j_3, m_{12}m_3 | jm) | (j_1j_2)j_{12}m_{12}\rangle | j_3m_3\rangle \\ &= \sum_{m_1m_2m_{12}m_3}(j_1j_2, m_1m_{12} | j_{12}m_{12})(j_{12}j_3, m_{12}m_3 | jm) | j_1m_1\rangle | j_2m_2 | j_3m_3\rangle \end{aligned} \tag{11.4.42}$$

通过类似计算另一种方式得到的耦合基矢为

$$\begin{aligned} &|(j_1(j_2j_3)j_{23})jm\rangle \\ &= \sum_{m_1m_2m_3m_{23}}(j_1j_{23}, m_1m_{23} | jm)(j_2j_3, m_2m_3 | j_{23}m_{23}) | j_1m_1\rangle | j_2m_2\rangle | j_3m_3\rangle \end{aligned} \tag{11.4.42'}$$

通过两种方式得到的耦合基矢都是正交归一化的，这一点由 C-G 系数的正交归一性立即可得到证明.

2. Racah 系数

由两种耦合方式得到的耦合基(11.4.42)和(11.4.42′)式之间一定存在一种变换，由于它们都是正交归一化基矢，这种交换一定是酉变换，令变换系数为

$$((j_1j_2)j_{12}, j_3, j | j_1(j_2j_3)j_{23}, j)$$

称为 Racah 系数，由于它描述两种耦合基矢间的变换，又称为再耦合系数. 利用 Racah 系数可把基矢$|((j_1j_2)j_{12}j_3)jm\rangle$表示为$|(j_1(j_2j_3)j_{23})jm\rangle$的线性组合，即

$$\begin{aligned} &|((j_1j_2)j_{12}, j_3)jm\rangle \\ &= \sum_{j_{13}}((j_1j_2)j_{12}j_3, j | j_1(j_2j_3)j_{23}j) | (j_1(j_2j_3)j_{23}) | jm\rangle \end{aligned}$$

因而

$$((j_1j_2)j_{12}j_3, j | j_1(j_2j_3)j_{23}j) = \langle (j_1(j_2j_3)j_{23})jm | ((j_1j_2)j_{12}j_3)jm\rangle \tag{11.4.43}$$

即 Racah 系数为两种耦合基矢的内积.

在(11.4.43)式中代入表达式(11.4.42)和(11.4.42′)可得到 Racah 系数的表达式为

$$\begin{aligned} &((j_1j_2)j_{12}j_3, j | j_1(j_2j_3)j_{23}j) \\ &= \sum_{m_1m_2m_3}\sum_{m_{12}m_{23}}(j_1j_2, m_1m_2 | j_{12}m_{12})(j_{12}j_3, m_{12}m_3 | jm)(j_2j_3, m_2m_3 | j_{23}m_{23})(j_1j_{23}, m_1m_{23} | jm) \end{aligned}$$

上式左端与 m 无关，因而把上式对 m 求和，然后除以$(2j+1)$得到

$$\begin{aligned} &((j_1j_2)j_{12}j_3, j | j_1(j_2j_3)j_{23}j) \\ &= \frac{1}{2j+1}\sum_{m_1m_2m_3}\sum_{m_{12}m_{23}m}(j_1j_2, m_1m_2 | j_{12}m_{12})(j_{12}j_3, m_{12}m_3 | jm) \\ &\quad \cdot (j_2j_3, m_2m_3 | j_{23}m_{23})(j_1j_{23}, m_1m_{23} | jm) \end{aligned} \tag{11.4.44}$$

把 C-G 系数换成 3-j 符号，得到

$$((j_1j_2)j_{12}j_3,j\mid j_1(j_2j_3)j_{23}j)$$
$$=[(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)](-1)^{j_1+j_2+j_3+j}\sum_{m_1m_2m_3m_{12}m_{23}m}(-1)^{j_1+j_2+j_3+j+j_{12}+j_{23}+m_1+m_2+m_{12}+m_3+m_{23}+m}$$
$$\cdot\begin{pmatrix}j_1 & j_2 & j_{23}\\ m_1 & m_2 & m_{23}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}j_1 & j_2 & j_{23}\\ \overline{m_1} & m & \overline{m_{23}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}j_2 & j_{23} & j\\ \overline{m_2} & \overline{m_{23}} & \overline{m_3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}j_{12} & j_3 & j\\ \overline{m_{12}} & m_3 & \overline{m}\end{pmatrix}\tag{11.4.45}$$

这就是 Racah 系数由 3-j 符号表示的公式. 由于 Racah 系数是两种耦合基矢间的酉变换，因而它满足如下正交归一性条件，即

$$\begin{cases}\sum_{j_{23}}((j_1j_2)j_{12}j_3,j\mid j_1(j_2j_3)j_{23}j)((j_1j_2)j_{12}',j_3j\mid j_1(j_2j_3)j_{23},j)=\delta_{j_{12}j_{12}'}\\ \sum_{j_{12}}((j_1j_2)j_{12}j_3,j\mid j_1(j_2j_3)j_{23}j)((j_1j_2)j_{12},j_3,j\mid j_1(j_2j_3)j_{23}',j)=\delta_{j_{23}j_{23}'}\end{cases}$$
$$\tag{11.4.46}$$

这两个关系按定义很容易证明，(由(11.4.45)式可看出 Racah 系数是实数，

$$((j_1j_2)j_{12}j_3,j\mid j_1(j_2j_3)j_{23}j)^+=(j_1(j_2j_3)j_{23},j\mid (j_1j_2)j_{12},j_3,j)$$
$$=((j_1j_2)j_{12}j_3,j\mid j_1(j_2j_3)j_{23}j)$$

3. 6-j 符号及其与 Racah 系数的关系

定义 6-j 符号为

$$\begin{Bmatrix}j_1 & j_2 & j_3\\ l_1 & l_2 & l_3\end{Bmatrix}$$
$$=\sum_{m_1m_2m_3\mu_1\mu_2\mu_3}(-1)^{j_1+j_2+j_3+l_1+l_2+l_3+m_1+m_2+m_3+\mu_1+\mu_2+\mu_3}$$
$$\cdot\begin{pmatrix}j_1 & j_2 & j_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}j_1 & l_2 & l_3\\ \overline{m_1} & \mu_2 & \overline{\mu_3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}j_2 & l_3 & l_1\\ \overline{m_2} & \mu_3 & \overline{\mu_1}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}j_3 & l_1 & l_2\\ \overline{m_3} & \mu_1 & \overline{\mu_2}\end{pmatrix}\tag{11.4.47}$$

由(11.4.45)式可看到 6-j 符号与 Racah 系数间的关系为

$$((j_1j_2)j_{12}j_3,j\mid j_1(j_2j_3)j_{23}j)$$
$$=(-1)^{j_1+j_2+j_3+j}[(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)]^{1/2}\begin{Bmatrix}j_1 & j_2 & j_3\\ j_3 & j & j_{23}\end{Bmatrix}\tag{11.4.48}$$

由(11.4.47)式中 3-j 符号的对称性，可得到 6-j 符号具有如下的对称性，即

(1) 6-j 符号任意置换两列数值不变.

(2) 任意取两列上下的符号 j 调换，6-j 符号不变. 6-j 符号的非零条件为满足三角形条件 $\triangle(j_1j_2j_3)$、$\triangle(j_1l_2l_3)$、$\triangle(l_1j_2l_3)$、$\triangle(l_1l_2j_3)$，一般用如下图形

{○—○—○} {○╲○—○} {○╱○╲○} {○—●╱○}

表示四个三角形条件.

6-j 符号的正交归一化条件为

$$\sum_{j_3}(2j_3+1)(2l_3+1)(-1)^{2(j_1+j_2+l_1+l_2)}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3' \end{Bmatrix} \quad (11.4.49)$$

6-j 符号的解析表达式为

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+l_1+l_2}\triangle(j_1j_2j_3)\triangle(j_1l_2l_3)\triangle(l_1j_2l_3)\triangle(l_1l_2j_3)\sum_k(-1)^k \frac{(j_1+j_2+l_1+l_2+1-k)!}{k!(j_1+j_2-j_3-k)!(l_1+l_2-j_3-k)!(j_1+l_2-l_3-k)!} \quad (11.4.50)$$

其中

$$\triangle(abc)=\left[\frac{(a+b+c)!\ (a-b+c)!\ (-a+b+c)!}{(a+b+c+1)}\right]^{1/2} \quad (11.4.51)$$

如果 6-j 符号中有一个 j 为 0，则 6-j 符号为

$$\begin{Bmatrix} 0 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix}=\delta_{l_2l_3}(-1)^{j_2+j_3+l_2}\frac{1}{\sqrt{(2j_2+1)(2l_2+1)}} \quad (11.4.52)$$

这个 6-j 符号在很多应用中是经常使用的.

4. 4 个角动量体系的广义 Racah 系数与 9-j 符号

在 4 个角动量耦合的体系中将出现广义 Racah 系数和 9-j 符号，在本节中对此做一些简要讨论.

1° 9-j 符号的定义及性质

4 个角动量 $\boldsymbol{J}_1$, $\boldsymbol{J}_2$, $\boldsymbol{J}_3$, $\boldsymbol{J}_4$ 系统，将构成 4 个 $SU_i(2)$, $i=1, 2, 3, 4$. 于是得到直积群

$$SU_1(2)\otimes SU_2(2)\otimes SU_3(2)\otimes SU_4(2)$$

如果角动量之间存在相互作用，将组合成总角动量 $\boldsymbol{J}=\sum_{i=1}^{4}\boldsymbol{J}_i$，可有两种方式进行耦合，即

$$\boldsymbol{J}=(\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2)+(\boldsymbol{J}_3+\boldsymbol{J}_4)=\boldsymbol{J}_{12}+\boldsymbol{J}_{34}$$

和

$$\boldsymbol{J}=(\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_3)+(\boldsymbol{J}_2+\boldsymbol{J}_4)=\boldsymbol{J}_{13}+\boldsymbol{J}_{24}$$

于是直积群存在两个群链，即

$$\begin{cases} SU_1(2)\otimes SU_2(2)\otimes SU_3(2)\otimes SU_4(2)\supset SU_{12}(2)\otimes SU_{34}(2)\supset SU(2) \\ SU_1(2)\otimes SU_2(2)\otimes SU_3(2)\otimes SU_4(2)\supset SU_{13}(2)\otimes SU_{24}(2)\supset SU(2) \end{cases} \quad (11.4.40')$$

这样便到得两种耦合基矢

$$|((j_1j_2)j_{12},(j_3j_4)j_{34})jm\rangle,\quad |((j_1j_3)j_{13},(j_2j_4)j_{24})jm\rangle$$

它们之间的变换系数为广义 Racah 系数

$$\begin{cases} |((j_1j_2)j_{12},(j_3j_4)j_{34})jm\rangle = \sum\limits_{m_{12}m_{34}}(j_{14}j_{34},m_{12}m_{34}|jm)|(j_1j_2)j_{12}m_{12}\rangle(j_3j_4)j_{34}m_{34}\rangle \\ |((j_1j_3)j_{13},(j_2j_4)j_{24})jm\rangle = \sum\limits_{m_{13}m_{24}}(j_{13}j_{24},m_{13}m_{24}|jm)|(j_1j_3)j_{13}m_{13}\rangle(j_2j_4)j_{24}m_{24}\rangle \end{cases} \tag{11.4.53}$$

可得到(11.4.53)式给出的广义 Racah 系数为

$$\begin{aligned} &((j_1j_2)j_{12},(j_3j_4)j_{34},j|(j_1j_3)j_{13},(j_2j_4)j_{24},j) \\ &= \sum_{\text{对所有}m}[(2j+1)(2j_{12}+1)(2j_{34}+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)]^{1/2} \\ &\cdot(-1)^{j_{12}-j_{34}+m+j_1-j_2+m_{12}}(-1)^{j_3-j_4+m_{34}+j_{13}-j_{24}+m+j_1-j_3+m_{13}+j_2-j_4+m_{23}} \\ &\cdot\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ m_1 & m_2 & \overline{m_{12}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_4 & j_{34} \\ m_3 & m_4 & \overline{m_{34}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_{12} & j_{34} & j \\ m_{13} & m_{34} & \overline{m} \end{pmatrix} \\ &\cdot\begin{pmatrix} j_{13} & j_{24} & j \\ m_{13} & m_{24} & \overline{m} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_{13} \\ m_1 & m_3 & \overline{m_{13}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_2 & j_4 & j_{24} \\ m_2 & m_4 & \overline{m_{24}} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{11.4.54}$$

整个耦合过程涉及 9 个角动量量子数 j_i，因而 4 个角动量耦合的 Racah 系数包括 9 个 j_i，可与 6-j 符号相类似的定义 9-j 符号，即

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix} &= \sum_{\text{对所有}m}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ m_1 & m_2 & m_{12} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_3 & j_4 & j_{34} \\ m_3 & m_4 & m_{34} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_{13} & j_{24} & j \\ m_{13} & m_{24} & m \end{pmatrix} \\ &\cdot\begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_{13} \\ m_1 & m_3 & m_{13} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_2 & j_4 & j_{24} \\ m_2 & m_4 & m_{24} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_{12} & j_{34} & j \\ m_{12} & m_{34} & m \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{11.4.55}$$

9 个角动量的 Racah 系数为

$$\begin{aligned} &((j_1j_2)j_{12},(j_3j_4)j_{34},j|(j_1j_3)j_{13},(j_2j_4)j_{24},j) \\ &= [(2j_{12}+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)(2j_{34}+1)]^{1/2}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_3 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix} \end{aligned} \tag{11.4.56}$$

(11.4.55)式定义的 9-j 符号可表示为 3 个 6-j 符号乘积的求和，即

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_3 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix} = \sum_{j'}(-1)^{2j'}(2_{j'}+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j' & j_3 & j_{13} \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_3 & j_4 & j_{34} \\ j & j_{12} & j' \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_{13} & j_{24} & j \\ j_4 & j' & j_2 \end{Bmatrix} \tag{11.4.57}$$

由(11.4.55)式或(11.4.57)式都可看出 9-j 符号具有对称性：对任意行或列进行偶置换 9-j 符号不变，而进行奇置换出现一个相因子 $(-1)^{\sum_i j_i}$.

当 9-j 符号中有一个 $j=0$，则 9-j 符号退化为 6-j 符号，即

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ c & d & e \\ f & f & 0 \end{Bmatrix} = (-1)^{b+c+e+f}\frac{1}{\sqrt{(2e+1)(2f+1)}}\begin{Bmatrix} a & b & f \\ c & a & e \end{Bmatrix} \tag{11.4.58}$$

9-j 符号的正交归一性为

$$
\begin{cases}
\displaystyle\sum_{j_{13}j_{24}}(2j_{12}+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)(2j_{34}+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12}' \\ j_3 & j_4 & j_{24}' \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{24} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix} = \delta_{j_{12}j_{12}'}\delta_{j_{24}j_{24}'} \\
\displaystyle\sum_{j_{12}j_{34}}(2j_{12}+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)(2j_{34}+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13}' & j_{24}' & j \end{Bmatrix} = \delta_{j_{13}j_{13}'}\delta_{j_{24}j_{24}'}
\end{cases}
\tag{11.4.59}
$$

2° 9-j 符号应用的简例

具有 4 个角动量最简单的量子体系是中心力场中两个电子体系. 因为中心力场中电子具有自旋和轨道角动量，单电子波函数为 $|\frac{1}{2}m_{s_1}l_1m_{l_1}\rangle$ 和 $|\frac{1}{2}m_{s_2}l_2m_{l_2}\rangle$，它们的积 $|\frac{1}{2}m_{s_1}l_1m_{l_1}\rangle\times|\frac{1}{2}m_{s_2}l_2m_{l_2}\rangle$ 构成直积群

$$SU_1(2)\otimes SO_1(3)\otimes SU_2(2)\otimes SO_4(3)$$

不可约表示的基矢. 但是如果考虑旋-轨作用，这种简单积构成的基矢是可约的，此时直积群有两种群链，即

$$SU_1(2)\otimes SO_1(3)\otimes SU_2(2)\otimes SO_2(3)\supset SU(2)\otimes SO(l)\supset SU(2)$$

此时为 S-L 耦合. 另一种为

$$SU_1(2)\otimes SO_1(3)\otimes SU_2(2)\otimes SO_2(3)\supset SU(2)\otimes SU'(2)\supset SU(2)$$

即 j-j 耦合. S-L 耦合下的耦合基矢为

$$
\begin{aligned}
&|((\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})S,(l_1l_2)L)JM_J\rangle \\
&=\sum_{m_{s_1}m_{s_2}M_s}\sum_{m_{l_1}m_{l_2}M_l}(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2},m_{s_1}m_{s_2}|SM_s) \\
&\quad\cdot(l_1l_2,m_{l_1}m_{l_2}|LM_l)(SL,M_SM_L|JM_J)|\tfrac{1}{2}m_{s_1}l_1m_{l_1}\rangle|\tfrac{1}{2}m_{s_2},l_2m_{l_2}\rangle
\end{aligned}
$$

j-j 耦合的耦合基矢为

$$
\begin{aligned}
&|((\tfrac{1}{2},l_1)j_1,(\tfrac{1}{2}l_2)j_2)JM_J\rangle \\
&=\sum_{m_{s_1}m_{l_1}m_{j_1}}\sum_{m_{s_2}m_{l_2}m_{j_2}}(\tfrac{1}{2}l_1,m_{s_1}m_{l_2}|j_1m_{j_1})(\tfrac{1}{2}l_2,m_{s_2}m_{l_2}|j_2m_{j_2})(j_1j_2,m_{j_1}m_{j_2}|JM_J) \\
&\quad\cdot|\tfrac{1}{2}m_{s_1}l_1m_{l_1}\rangle|\tfrac{1}{2}m_{s_2}l_2m_{l_2}
\end{aligned}
$$

Racah 系数为

$$
\begin{aligned}
&\langle[(\tfrac{1}{2}l_1)j_1,(\tfrac{1}{2}l_2)j_2]JM_J|((\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2})S,(l_1l_2)L)JM_J\rangle \\
&=((\tfrac{1}{2}l_1)j_1,(\tfrac{1}{2}l_2)j_2,J|(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2})S,(l_1l_2)L,J)
\end{aligned}
$$

按定义和 C-G 系数的性质可得到

$$
\begin{aligned}
&((\tfrac{1}{2}l_1)j_1,\ (\tfrac{1}{2}l_2)j_2,\ J \mid (\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2})S,\ (l_1l_2)L) \\
&= [(2j_1+1)(2j_2+1)(2S+1)(2L+1)]^{1/2}\begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & l_1 & j_1 \\ \frac{1}{2} & l_2 & j_2 \\ S & L & J \end{Bmatrix}
\end{aligned}
\tag{11.4.60}
$$

4 个以上的 n 个角动量耦合问题涉及 $3n$-3 符号问题，在此就不讨论了.

这节所讨论的问题与第三章讨论的点群 C-G 系数是完全平行的，只是 $SO(3)$ 群直积分解没有重复出现问题，而点群直积分解有重复出现问题，因而点群中这类问题更为复杂.

11.5　$SO(3)$ 群的不可约张量算子和 Wigner-Eckart 定理

11.5.1　$SO(3)$ 群的不可约张量算子

1. $SO(3)$ 群的张量与不可约张量

如果量 T 有 3^n 个分量，它们为

$$
T_{i_1i_2\cdots i_3},\quad i_1,\ i_2,\ \cdots,\quad i_3=1,\ 2,\ 3
$$

在 $SO(3)$ 群算子 $\hat{P}(R)$，$R\in SO(3)$ 作用下，变换规律为

$$
\hat{P}(R)T=T' \tag{11.5.1}
$$

T' 的分量

$$
T'_{i_1i_2\cdots i_n} = \sum_{j_1j_2\cdots j_n} a_{i_1j_1}a_{i_2j_2}\cdots a_{i_nj_n}T_{j_1j_2\cdots j_n} \tag{11.5.2}
$$

其中 $R\in SO(3)$ 为

$$
R=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}
$$

即 a_{ij} 为旋转矩阵 R 的矩阵元，则称由 3^n 个分量构成的量 T 为 n 阶张量，因为它的分量按 $SO(3)$ 群变换.

实际上 $a_{i_1j_1}a_{i_2j_2}\cdots a_{i_nj_n}$ 是直积群

$$
SO(3)\otimes SO(3)\otimes\cdots\otimes SO(3)=SO(3)^{\otimes n}
$$

的元素. $SO(3)$ 的元素 R 为三维空间 $\mathbf{R}^3$ 上的单模正交变换，而直积群 $SO(3)^{\otimes n}$ 是直积空间 $\mathbf{R}^{3^n}$ 上的单模正交变换. 因而 3^n 个分量的张量 T 相当于 $\mathbf{R}^{3^n}$ 空间的向量. 正像 3^n 维空间中的向量构成 $SO(3)$ 群三维表示的基矢一样，(11.5.2)式说明张量 T 也是 $\mathbf{R}^{3^n}$ 维空间中直积群 $SO(3)^{\otimes n}$ 的一个表示的基矢，对于直积群 $SO(3)^{\otimes n}$ 这个表示是不可约的，但是对 $SO(3)$ 群是可约的.

由于张量 T 的 3^n 个分量 $\{T_{i_1i_2\cdots i_n}\}$ 对 $SO(3)$ 群是可约的，因而可通过适当线性组合，把它们分划为若干个子集，每个子集在 $SO(3)$ 群作用下都是不变的. 这样就把 n 阶张量 T 分解成了不可约张量的直和.

因而可以定义 $SO(3)$ 群的不可约张量 $T^{(k)}$，它有 $2k+1$ 个分量，$(2k+1)$ 是 $SO(3)$ 群不可约表示 (k) 的维数. 在 $SO(3)$ 群作用下，这 $2k+1$ 个分量按不可约表示 $D^{(k)}$ 变换.

下面以 2 阶张量 T 为例进行讨论. 2 阶张量 T 有 9 个分量 T_{ij}，$i,j=1,2,3$，可写成一个矩阵形式，即

$$T=\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix}$$

以 $SO(3)$ 群元素

$$R=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}\in SO(3)$$

作用张量 T，有

$$RTR^{-1} = T'$$

$$(RTR^{-1})_{ij} = T'_{ij} = \sum_{kl} a_{ik}T_{kl}\tilde{a}_{lj} = \sum_{kl} a_{ik}a_{jl}T_{kl}$$

这就说明 T 是 $SO(3)$ 群的 2 阶张量.

如果把 T 分解为三个张量的直和，即

$$T=T^{(0)}\oplus T^{(1)}\oplus T^{(2)}$$

其中

$$T^{(0)} = \mathrm{tr}(T)E = (\sum_i T_{ii})\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$T^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & A_{12} & A_{13} \\ -A_{12} & 0 & A_{23} \\ -A_{13} & -A_{23} & 0 \end{pmatrix}$$

$$T^{(2)} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{12} & S_{22} & S_{23} \\ S_{13} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix}$$

$$A_{ij} = \frac{1}{2}(T_{ij}-T_{ji})$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2}(T_{ij}+T_{ji}),\ i\neq j,\ S_{ii} = \mathrm{tr}(T)-T_{jj}-T_{kk}$$

$$i\neq j\neq k,\quad i,j,k=1,2,3$$

$T^{(0)}$ 为一纯量矩阵 λE，$T^{(1)}$ 只有三个独立分量，$T^{(2)}$ 只有 5 个独立分量(因为在 $\mathrm{tr}(T)$ 一定

下，S_{11}，S_{22}，S_{33}中只有两个独立变量）．容易看到 $T^{(0)}$ 在 $SO(3)$ 群的变化下是一不变量（标量），称为 0 秩不可约张量，$T^{(1)}$ 有三个独立分量和 $T^{(2)}$ 有 5 个独立分量都是在 $SO(3)$ 群变化下的不变集合，因而称它们为 1 秩和 2 秩不可约张量．这样 2 阶张量可分解为 0 秩，1 秩和 2 秩不可约张量的直和．

2. 不可约张量算子

如果张量 T 是包括 3^n 个分量 $T_{i_1 i_2 \cdots i_n}$ 的算子，它们也可分解为若干不可约张量算子的直和．下面对不可约张量算子给出定义．

定义 11.5.1（不可约张量算子） 如果 $2k+1$ 个算子 $T_q^k(q=-k,\ -k+1,\ \cdots,\ k)$ 在 $SO(3)$ 群的作用下，按 $SO(3)$ 群不可约表示 $D^{(k)}$ 变换，即

$$\hat{P}(R)T_q^k\hat{P}(R)^{-1} = \sum_{q'} D^{(k)}(R)_{q'q}T_{q'}^k, \quad R \in SO(3) \tag{11.5.3}$$

则称算子集合 $\{T_q^k,\ q=-k,\ -k+1,\ \cdots,\ k\}$ 为 $SO(3)$ 群的 k 秩不可约张量算子．

由这个定义出发，还可导出不可约张量算子的另一种形式的定义．

绕 x，y，z 轴转 φ 角的算子分别为

$$\hat{P}_x(\varphi)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi J_x}, \quad \hat{P}_y(\varphi)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi J_y}, \quad \hat{P}_z(\varphi)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi J_z}$$

对无穷小转动它们可表示为

$$\hat{P}_x(\delta\varphi)=1-\mathrm{i}\delta\varphi J_x, \quad \hat{P}_y(\delta\varphi)=1-\mathrm{i}\delta\varphi J_y, \quad \hat{P}_z(\delta\varphi)=1-\mathrm{i}\delta\varphi J_z$$

于是不可约张量算子的定义（11.5.3）式在无穷小转动 $P_z(\delta\varphi)$ 的作用下变化规则为

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta\varphi J_z}T_q^k\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta\varphi J_z} &= (1-\mathrm{i}\delta\varphi J_z)T_q^k(1+\mathrm{i}\delta\varphi J_z) \\
&= T_q^k - \mathrm{i}\delta\varphi[J_z,\ T_q^k] \\
&= \sum_{q'} D^{(k)}(\delta\varphi,\ 0,\ 0)_{q'q}T_{q'}^k \\
&= (1-\mathrm{i}\delta\varphi q)T_q^k
\end{aligned}$$

因而得到

$$[J_z,\ T_q^k]=qT_q^k \tag{11.5.4}$$

在得到此式时利用 $D^{(k)}(\delta\varphi,\ 0,\ 0)_{qq'}=\delta_{qq'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta\varphi q}=\delta_{qq'}(1-\mathrm{i}\delta\varphi q)$．对于 $\hat{P}_y(\delta\varphi)$ 得到

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta\varphi J_y}T_q^k\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta\varphi J_y} &= T_q^k - \mathrm{i}\delta\varphi[J_z,\ T_q^k] \\
&= \sum_{q'} D^{(k)}(0,\ \delta\varphi,\ 0)_{qq'}T_{q'}^k \\
&= \sum_{q'} d^{(k)}(\delta\varphi)_{qq'}T_{q'}^k
\end{aligned}$$

在 $d^{(k)}(\beta)_{qq'}$ 的表达式（11.3.34）式中，当 $\beta=\delta\varphi$ 时，取 $\sin\dfrac{\beta}{2}=\dfrac{\delta\varphi}{2}$，展开式中只能保留 $(\delta\varphi)^0=1$ 和 $\delta\varphi$ 两项，于是由（11.3.34）式得到

$$\begin{aligned}
&\sum_{q'} D^{(k)}(0,\ \beta,\ 0)_{qq'}T_{q'}^k \\
&= T_q^k - \frac{\delta\varphi}{2}\left[\sqrt{(k-q)(k+q+1)}T_{q+1}^k - \sqrt{(k+q)(k-q+1)}T_{q-1}^k\right]
\end{aligned}$$

由此得到

$$[J_y, T_q^k] = \frac{1}{2i}\{[(k-q)(k+q+1)]^{1/2}T_{q+1}^k - [(k+q)(k-q+1)]^{1/2}T_{q-1}^k\} \quad (11.5.4')$$

同样对 $e^{-i\delta\varphi J_x}$ 可得到

$$e^{-i\delta\varphi J_x}T_q^k e^{i\delta\varphi J_x} = T_q^k - i\delta\varphi[J_x, T_q^k] = \sum_{q'} D^{(k)}\left(-\frac{\pi}{2}, \delta\varphi, \frac{\pi}{2}\right)_{q'q} T_{q'}^k$$

在得到上式时利用了

$$e^{-i\varphi J_x} = e^{\frac{i\pi}{2}J_z}e^{-i\varphi J_y}e^{-\frac{i\pi}{2}J_z}$$

此式可由交换关系 $[J_y, J_z] = iJ_x$ 得到证明，与得到(11.5.4′)式相似. 把 $D^{(k)}\left(-\frac{\pi}{2}, \delta\varphi, \frac{\pi}{2}\right)_{q'q}$ 用(11.3.34)式展开，并只保留 $\left(\sin\frac{\delta\varphi}{2}\right) = \frac{\delta\varphi}{2}$ 的零次幂和一次幂的项，最后可得到

$$[J_x, T_q^k] = \frac{1}{2}\{[(k-q)(k+q+1)]^{1/2}T_{q+1}^k + [(k+q)(k-q+1)]^{1/2}T_{q-1}^k\} \quad (11.5.4'')$$

归纳(11.5.4), (11.5.4′)和(11.5.4″)式，得到

$$\begin{cases} [J_z, T_q^k] = qT_q^k \\ [J_\pm, T_q^k] = \frac{1}{\sqrt{2}}[(k \pm q)(k \mp q + 1)]^{1/2}T_{q+1}^k \end{cases} \quad (11.5.5)$$

有的书定义 $J_\pm = J_x \pm iJ_y$，此时上式之第二式为

$$[J_\pm, T_q^k] = [(k\pm q)(k\mp q+1)]^{1/2}T_{q+1}^k$$

因而 Racah 以(11.5.5)式作为 $SO(3)$ 群不可约张量算子的定义(参见 G. Racah "Theory of Complex Spectra" phys. Rew. 61, 186(1942), 62, 438(1942), 63, 367, (1943)).

在前面我们由定义(11.5.3)式推出了 Racah 的定义(11.5.5)式，同样由 Racah 的定义利用 11.3 节的方法也可推出(11.5.3)式. 因而这两种定义是等价的.

下面举两个不可约张量算子的例子.

例 1　对于旋轨空间 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{S} + \boldsymbol{L}$ 定义的 $SU(2)$ 群(或双值群 $SO(3)$)

$$S_\alpha^{(1)}\left(S_0^{(1)} = S_z,\ S_{\pm1}^{(1)} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(S_x \pm iS_y)\right)$$

和

$$L_\alpha^{(1)}\left(L_0^{(1)} = L_z,\ L_{\pm1}^{(1)} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(L_x \pm L_y)\right)$$

为 1 秩不可约张量算子.

由于 $[S_\alpha, L_\beta] = 0$，可得到

$$[J_0, S_\alpha^{(1)}] = \alpha S_\alpha^{(1)}$$

$$[J_{+1}, S_\alpha^{(1)}] = \left[\frac{(1-\alpha)(1+\alpha+1)}{2}\right]^{1/2}S_{\alpha+1}^{(1)}$$

$$[J_{-1}, S_\alpha^{(1)}] = \left[\frac{(1+\alpha)(1-\alpha+1)}{2}\right]^{1/2}S_{\alpha-1}^{(1)}$$

$$[J_0, L(1)_\alpha] = \alpha L_\alpha^{(1)}$$

$$[J_{+1}, L_\alpha^{(1)}] = \left[\frac{(1-\alpha)(2+\alpha)}{2}\right]^{1/2} L_{\alpha+1}^{(1)}$$

$$[J_{-1}, L_\alpha^{(1)}] = \left[\frac{(1+\alpha)(2-\alpha)}{2}\right]^{1/2} L_{\alpha-1}^{(1)}$$

例 2 把球谐函数 $Y_m^l(\boldsymbol{n})$ 视为算子，它为 l 秩不可约张量算子.

把 $Y_m^l(\boldsymbol{n})$ 视为算子，它作用于任意函数 $f(\boldsymbol{r})$ 上为 $Y_m^l(\boldsymbol{n})f(\boldsymbol{r})$，而后用 J_μ 作用，则为

$$J_\mu[Y_m^l(\boldsymbol{n})f(\boldsymbol{r})] = (J_\mu Y_m^l(\boldsymbol{n}))f(\boldsymbol{r}) + Y_m^l(\boldsymbol{n})(J_\mu f(\boldsymbol{r}))$$

由此得到

$$[J_\mu Y_m^l(\boldsymbol{n}) - Y_m^l(\boldsymbol{n})J_\mu]f(\boldsymbol{r}) = [J_\mu Y_m^l(\boldsymbol{n})]f(\boldsymbol{r}) = J_\mu Y_m^l(\boldsymbol{n})f(\boldsymbol{r})$$

因为 $f(\boldsymbol{r})$ 是任意函数，于是得到

$$[J_\mu, Y_m^l(\boldsymbol{n})] = J_\mu Y_m^l(\boldsymbol{n}) \tag{11.5.6}$$

而 $Y_m^l(\boldsymbol{n})$ 为 $SO(3)$ 群不可约表示的基矢 $|lm\rangle$，利用 11.3 中的结果就证明了 $Y_m^l(\boldsymbol{n})$ 符合关于不可约张量的定义(11.5.5)式，因而为 l 秩不可约张量算子.

可同样把 $\boldsymbol{r}$ 视为算子，则 $r_0^{(1)} = z$，$r_{\pm1}^{(1)} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(x \pm \mathrm{i}y)$，为 1 秩不可约张量算子.

3. 耦合张量算子

张量算子 $T_{q_1}^{k_1}$，$V_{q_2}^{k_2}$ 的简单积 $T_{q_1}^{k_1}V_{q_2}^{k_2}$ 不是不可约张量算子，但可以定义耦合张量算子，即

$$[T^{k_1}V^{k_2}]_q^k = \sum_{q_1q_2}(k_1k_2, q_1q_2 \mid kq)T_{q_1}^{k_1}V_{q_2}^{k_2} \tag{11.5.7}$$

$[T^{k_1}V^{k_2}]_q^k$ 是 k 秩不可约张量算子. 为了对此进行证明，用群算子 $\hat{P}(R)$ 作用(11.5.7)式，得到

$$\begin{aligned}
&\hat{P}(R)[T^{k_1}V^{k_2}]_q^k\hat{P}(R)^{-1} \\
&= \sum_{q_1q_2}(k_1k_2, q_1q_2 \mid kq)\hat{P}(R)T_{q_1}^{k_1}V_{q_2}^{k_2}\hat{P}(R)^{-1} \\
&= \sum_{q_1q_2}(k_1k_2, q_1q_2 \mid kq)\hat{P}(R)T_{q_1}^{k_1}\hat{P}(R)^{-1}\hat{P}(R)V_{q_2}^{k_2}\hat{P}(R)^{-1}
\end{aligned}$$

利用(11.5.3)式得到

$$\begin{aligned}
&\hat{P}(R)[T^{k_1}V^{k_2}]_q^k\hat{P}(R)^{-1} \\
&= \sum_{q_1q_2}(k_1k_2, q_1q_2 \mid kq)\sum_{q_1'q_2'}D^{(k_1)}(R)_{q_1'q_1}T_{q_1'}^{k_1}D^{(k_2)}(R)_{q_2'q_2}T_{q_2'}^{k_2}
\end{aligned}$$

利用公式

$$\begin{aligned}
&\sum_{q_1q_2}(k_1k_2, q_1q_2 \mid kq)D^{(k_1)}(R)_{q_1'q_1}D^{(k_2)}(R)_{q_2'q_2} \\
&= \sum_{q'}(k_1k_2, q_1'q_2' \mid kq')D^{(k)}(R)_{qq'}
\end{aligned} \tag{11.5.8}$$

就可得到

$$\hat{P}(R)[T^{k_1}V^{k_2}]_q^k\hat{P}(R)^{-1} = \sum_{q_1'q_2'q'}(k_1k_2, q_1'q_2' \mid kq')D_{q_1'}^{k_1}D_{q_2'}^{k_2}D^{(k)}(R)_{q'q}$$

$$= \sum_{q'} D^{(k)}(R)_{q'q}[T^{k_1}V^{k_2}]^k_{q'} \tag{11.5.9}$$

这就证明了耦合张量算子$[T^{k_1}V^{k_2}]^k_q$是 k 秩不可约张量算子.

公式(11.5.8)式容易得到. 下面就予以证明. 用 $\hat{P}(R)$作用于耦合基矢得到

$$\begin{aligned}
&\hat{P}(R) \mid (j_1j_2)jm\rangle \\
&= \sum_{m'} D^{(j)}(R)_{m'm} \mid (j_1j_2)m'\rangle \\
&= \sum_{m'}^{m'} D^{(j)}(R)_{m'm} \sum_{m_1'm_2'} (j_1j_2,\ m_1m_2 \mid jm') \mid j_1m_1',\ j_2m_2'\rangle
\end{aligned}$$

另一方面

$$\begin{aligned}
&\hat{P}(R) \mid (j_1j_2)jm\rangle \\
&= \sum_{m_1m_2} (j_1j_2,\ m_1m_2 \mid jm')\hat{P}(R) \mid j_1m_1,\ j_2m_2\rangle \\
&= \sum_{m_1m_2} (j_1j_2,\ m_1m_2 \mid jm) \sum_{m_1'm_2'} D^{(j_1)}(R)_{m_1'm_1} D^{(j_2)}(R)_{m_2'm_2} \mid j_1m_1',\ j_2m_2'\rangle
\end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned}
&\sum_{mm_1'm_2'} (j_1j_2,\ m_1'm_2' \mid jm')D^{(j)}(R)_{m'm} \mid j_1m_1,\ j_2m_2'\rangle \\
&= \sum_{m_1m_2}\sum_{m_1'm_2'} (j_1j_2,\ m_1m_2 \mid jm)D^{(j_1)}(R)_{m_1'm_1} D^{(j_2)}(R)_{m_2'm_2} \mid j_1m_1',\ j_2m_2'\rangle
\end{aligned}$$

因而

$$\begin{aligned}
&\sum_{m'} (j_1j_2,\ m_1'm_2' \mid jm')D^{(j)}(R)_{m'm} \\
&= \sum_{m_1m_2} (j_1j_2,\ m_1m_2 \mid jm)D^{(j_1)}(R)_{m_1'm_1} D^{(j_2)}(R)_{m_2'm_2}
\end{aligned}$$

即(11.5.8)式.

如果 $k_1 = k_2 = k$，则耦合张量算子

$$[T^kV^k]^0_0 = \sum_{q_1q_2} (kk,\ q_1q_2 \mid 00)T^k_{q_1}V^k_{q_2}$$

利用$(kk,\ q_1q_2 \mid 00) = \dfrac{1}{\sqrt{2k+1}}(-1)^{k-q_1}\delta_{q_1\overline{q_2}}$得到

$$[T^kV^k]^0_0 = \frac{1}{\sqrt{2k+1}}(-1)^{k-q}T^k_qV^k_{-q} \tag{11.5.10}$$

通常定义

$$T^kV^k = \sqrt{2k+1}[T^kV^k]^0_0 \tag{11.5.10'}$$

也称为 T^k_q 与 V^k_q 的点乘积，在很多物理问题中是经常使用的.

11.5.2 Wigner-Eckart 定理

1. $SO(3)$群不可约张量算子的 W-E 定理

计算描述一定物理量的不可约张量算子$\{T^k_q\}$与 $SO(3)$群不可约基矢$\{\mid \alpha jm\rangle\}$间的矩

阵元是量子理论计算中时常遇到的问题，W-E 定理对这种计算给出了一种非常一般的方法，因而在实际使用中是有重大意义的. 在第三章中已给出了这个定理，只是没有进行证明. 下面就证明这个定理.

定理 11.5.1(W-E 定理) 如果 T_q^k 是 $SO(3)$ 群的 k 秩不可约张量算子，$|\alpha_i j_i m_i\rangle$ 是 $SO(3)$ 群的不可约表示 j_i 的不可约表示基矢，则矩阵元 $\langle j_1 m_1 | T_q^k | j_2 m_2\rangle$ 为

$$\langle \alpha_1 j_1 m_1 \mid T_q^k \mid \alpha_1 j_2 m_2\rangle = (-1)^{j_1-m_1}\begin{pmatrix} j_1 & k & j_2 \\ -m_1 & q & m_2\end{pmatrix}\langle \alpha_1 j_1 \parallel T^k \parallel \alpha_2 j_2\rangle$$

其中 $\langle \alpha_1 j_1 \parallel T^k \parallel \alpha_2 j_2\rangle$ 称为约化矩阵元(reduced matrix element)它与 m_1, m_2 和 q 无关.

证明 在矩阵元 $\langle \alpha_1 j_1 m_1 | T_q^k | \alpha_1 j_2 m_2\rangle$ 中插入 $\hat{P}(R)\hat{P}(R)^{-1}$ 矩阵元不变，即

$$\langle \alpha_1 j_1 m_1 \mid T_q^k \mid \alpha_1 j_2 m_2\rangle = \langle \alpha_1 j_1 m_1 \mid \hat{P}(R)\hat{P}(R)^{-1} T_q^k \hat{P}(R)^{-1}\hat{P}(R) \mid \alpha_1 j_2 m_2\rangle$$

上式右端

$$\hat{P}(R) \mid \alpha_1 j_2 m_2\rangle = \sum_{m_2'} D^{(j_2)}(R)_{m_2'm_2} \mid \alpha_2 j_2 m_2'\rangle$$

$$\begin{aligned}\langle \alpha_1 j_1 m_1 \mid \hat{P}(R)^{-1} &= \hat{P}(R) \mid \alpha_1 j_1 m_1\rangle \\ &= \{\sum_{m_1'} D^{(j_1)}(R)_{m_1'm_1} \mid \alpha_1 j_1 m_1'\rangle\}^+ \\ &= \sum_{m_1'} \langle \alpha_1 j_1 m_1' \mid D^{(j_1)}(R)^*_{m_1'm_1}\end{aligned}$$

$$\hat{P}(R) T_q^k \hat{P}(R)^{-1} = \sum_{q'} D^{(k)} R_{q'q} T_{q'}^k$$

因而

$$\langle \alpha_1 j_1 m_1 \mid T_q^k \mid \alpha_2 j_2 m_2\rangle = \sum_{m_1' m_2' q'} D^{(j_1)}(R)^*_{m_1 m_1'} D^k(R)_{qq'} D^{(j_2)}(R)_{m_2'm_2}\langle \alpha_1 j_1 m_1' \mid T_{q'}^k \mid \alpha_2 j_2 m_2'\rangle$$

对上式两端进行群上积分，则

$$\begin{aligned}&\langle \alpha_1 j_1 m_1 \mid T_q^k \mid \langle \alpha_2 j_2 m_2\rangle \frac{1}{8\pi^2}\int \mathrm{d}R \\ &= \langle \alpha_1 j_1 m_1 \mid T_q^k \mid \langle \alpha_2 j_2 m_2\rangle \\ &= \frac{1}{8\pi^2}\sum_{m_1' m_2' q'}\int D^{(j_1)}(R)^*_{m_1 m_1'} D^{(k)}(R)_{q'q} D^{(j_2)}(R)^*_{m_2'm_2}\mathrm{d}R\langle \alpha_1 j_1 m_1' \mid T_{q'}^k \mid \alpha_2 j_2 m_2'\rangle\end{aligned}$$

由(11.4.9)式得到

$$\begin{aligned}&\frac{1}{8\pi^2}\int D^{(j_1)*}(R)_{m_1 m_1'} D^{(k)}(R)_{q'q} D^{(j_2)}(R)_{m_2'm_2}\mathrm{d}R \\ &= \frac{1}{2j_1+1}(j_2 k,\ m_2' q' \mid j_1 m_1')(j_2 k,\ m_2 q \mid j_1 m_1)\end{aligned}$$

于是

$$
\begin{aligned}
&\langle \alpha_1 j_1 m_1 \mid T_q^k \mid \alpha_2 j_2 m_2 \rangle \\
&= \frac{1}{2j_1+1}(j_2 k,\ m_2 q \mid j_1 m_1) \sum_{m_1' m_2' q'} (j_2 k,\ m_2' q' \mid j_1 m_1') \langle \alpha_1 j_1 m_1' \mid T_q^k \mid \alpha_2 j_2 m_2' \rangle \\
&= \frac{1}{2j_1+1}(j_2 k,\ m_2 q \mid j_1 m_1) \sum_{m_1'} (-1)^{j_2+k+j_1} \langle \alpha_1 j_1 m_1' \mid [T^k,\ \alpha_2 j_2 \rangle]_{m_1'}^{j_1} \rangle \qquad (11.5.12)
\end{aligned}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
&\sum_{m_2' q'} (j_2 k,\ m_2' q' \mid j_1 m_1') T_{q'}^k \mid \alpha_2 j_2 m_2' \rangle \\
&= (-1)^{j_2+k+j_1} \sum_{m_2' q'} (k j_2,\ q' m_2' \mid j_1 m_1') T_{q'}^k \mid \alpha_2 j_2 m_2' \rangle \\
&= (-1)^{j_2+k+j_1} \mid [T^k,\ \alpha_2 j_2]_{m_1'}^{j_1} \rangle \qquad (11.5.13)
\end{aligned}
$$

$|[T^k,\ \alpha_2 j_2]_{m_1'}^{j_1}\rangle$是按 $SO(3)$群不可约表示 j_1 变换的基矢. 但是它与$|j_1 m'\rangle$虽然在 $SO(3)$群作用下有相同的变换规律，在其它性质上是完全不同的，因为它是由不可约张量作用于$|j_2 m_2\rangle$之后再耦合成的基矢.

Winger 曾讨论了按群 G 不可约酉表示 Γ 变换的各种不同物理性质的基矢$|\varphi_\gamma^\Gamma\rangle$之间的正交关系. 群 G 可以是有限群也可以是连续群，他得到

$$
\langle \varphi_\gamma^\Gamma \rangle | \psi_{\gamma'}^{\Gamma'} \rangle = \delta_{\Gamma\Gamma'} \delta_{\gamma\gamma'} f(\Gamma) \qquad (11.5.14)
$$

其中$f(\Gamma)$是只与不可约表示 Γ 有关的函数，与 γ 无关. 一般称为 Winger 基矢正交定理.

利用这一结果，很容易证明(11.5.13)式.

因为

$$
\begin{aligned}
\langle \varphi_\gamma^\Gamma \mid \varphi_{\gamma'}^{\Gamma'} \rangle &= \langle \varphi_\gamma^\Gamma \mid \hat{P}(R)^{-1} \hat{P}(R) \mid \varphi_{\gamma'}^{\Gamma'} \rangle \\
&= \sum_{\rho\rho'} D^{(\Gamma)}(R)_{\rho\gamma}^* D^{(\Gamma')}(R)_{\rho'\gamma'} \langle \varphi_\gamma^\Gamma \mid \varphi_{\gamma'}^{\Gamma'} \rangle
\end{aligned}
$$

如群 G 是有限群，上式对群元素求和并除以群的维数 n_G，如为连续群上式对群积分并除以群体积，则得到(11.5.14)式.

$$
\begin{aligned}
\langle \varphi_\gamma^\Gamma \mid \varphi_{\gamma'}^{\Gamma'} \rangle &= \sum_{\rho\rho'} \frac{1}{\int \mathrm{d}R} \int D^{(\Gamma)}(R)_{\rho\gamma}^* D^{(\Gamma')}(R)_{\rho'\gamma'} \mathrm{d}R \langle \varphi_\rho^\Gamma \mid \varphi_{\rho'}^{\Gamma'} \rangle \\
&= \delta_{\Gamma\Gamma'} \delta_{\gamma\gamma'} \sum_\rho \langle \varphi_\rho^\Gamma \mid \psi_\rho^\Gamma \rangle \\
&= \delta_{\Gamma\Gamma'} \delta_{\gamma\gamma'} f(\Gamma)
\end{aligned}
$$

在得到此式时利用了不可约表示矩阵的广义正交定理.

利用(11.5.14)式，(11.5.12)式为

$$
\begin{aligned}
\langle \alpha_1 j_1 m_1 \mid T_q^k \mid \alpha_2 j_2 m_2 \rangle &= \frac{1}{2j_1+1}(j_2 k,\ m_2 q \mid j_1 m_1) \sum_{m_1'} \langle \alpha_1 j_1 \| T^k \| \alpha_2 j_2 \rangle' \\
&= (j_2 k_1 m_2 q \mid j_1 m_1) \langle \alpha_1 j_1 \| T^k \| \alpha_2 j_2 \rangle' \qquad (11.5.15)
\end{aligned}
$$

这就是 W-E 定理.

一般把 C-G 系数写为 3-j 符号，即

$$(j_1k,\ m_2q\mid j_1m_1)=(-1)^{j_2-k-m_1}\frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}\begin{pmatrix} j_2 & k & j_1\\ m_2 & q & -m_1\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}(-1)^{j_1-m_1+2j_2}\begin{pmatrix} j_1 & k & j_2\\ -m_1 & q & m_2\end{pmatrix}$$

则(11.5.15)式为

$$\langle\alpha_1j_1m_1\mid T_q^k\mid\alpha_2j_2m_2\rangle$$

$$=(-1)^{j_1-m_1}\begin{pmatrix} j_1 & k & j_2\\ -m_1 & q & m_2\end{pmatrix}\langle\alpha_1j_1\parallel T^k\parallel\alpha_2j_2\rangle \tag{11.5.15'}$$

其中约化矩阵元为

$$\langle\alpha_1j_1\parallel T^k\parallel\alpha_2j_2\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}(-1)^{2j_2}\langle\alpha_1j_1\parallel T^k\parallel\alpha_2j_2\rangle'$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}(-1)^{2j_2}\frac{1}{2j_1+1}\sum_{m_1}(-1)^{j_1+j_2+k}\langle\alpha_1j_1m_1\mid[T^k,\ \alpha_2j_2]_{m_1}^{j_1}\rangle$$

(11.5.25′)式是 W-E 定理的通用形式.

W-E 定理的实质在于：矩阵元$\langle\alpha_1j_1m_1\mid T_q^k\mid\alpha_2j_2m_2\rangle$中的基矢$\mid\alpha_1j_1m_2\rangle$，$\mid\alpha_2j_2m_2\rangle$和不可约张量算子$T_q^k$尽管在物理上可能有各种不同的物理意义，但是在几何上，它们在空间转动下都按$SO(3)$群的不可约表示j_1，j_2和k变换，因而这种$SO(3)$下的变换性质一定也反映在矩阵元之中，反映这种规律的就是 W-E 定理中的 3-j 符号. 具体基矢和具体张量算子在物理上可以有千差万别，但空间旋转下的规律是不变的，因而有共同的 3-j 符号. 而物理上的不同表现为约化矩阵元的各不相同上. 而物理上的具体的基矢$\mid\alpha,jm\rangle$和不可约张量T_q^k，它们的分量m和q是这些物理量在空间z方向的投影，它们属于空间的性质，因而它们表现在 3-j 符号之中，而与具体物理性质决定的约化矩阵元无关. 由于这种原因，通常称 3-j 符号为矩阵元的几何因子，称约化矩阵元为物理因子. W-E 定理是利用$SO(3)$的变换性质，把几何因子和物理因子分离开来.

上面讨论的是$SO(3)$的 W-E 定理，一般来讲对于任意群，群的不可约张量和基矢间的矩阵元都有相应的 W-E 定理，而且在形式上是类似的，几何因子为这个群的 C-G 系数，物理因子为相应的约化矩阵元. 在第三章中曾讨论了点群的 W-E 定理.

2. 耦张量算子的 W-E 定理

如果双粒子体系中不可约张量算子$T^{k_1}(1)$与$T^{k_2}(2)$分别作用于粒子 1 和 2，它们的耦合张量为

$$[T^{k_1}(1)T^{k_2}(2)]_q^k=\sum_{q_1q_2}(k_1k_2,\ q_1q_2\mid kq)T(1)_{q_1}^{k_1}T(2)_{q_2}^{k_2}$$

耦合基矢为

$$\mid(j_1j_2)jm\rangle=\sum_{m_1m_2}(j_1j_2,\ m_1m_2\mid jm)\mid j_1m_1,\ j_2m\rangle$$

其中$\mid j_1m_1,\ j_2m_2\rangle=\mid j_1m_1\rangle\mid j_2m_2\rangle$，$\mid j_1m_1\rangle$，$\mid j_2m_2\rangle$分别为粒子 1 和 2 的基矢.

耦合张量算子的矩阵元按 Wkigner-Eckart 定理为

$$
\begin{aligned}
&\langle (j_1j_2)jm \mid [T(1)^{k_1}T^{k_2}(2)]^k_q \mid (j_1'j_2')j'm'\rangle \\
&= (-1)^{j-m}\begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix}\langle (j_1j_2)j \| [T^{k_1}(1)T^{k_2}(2)]^k \| (j_1'j_2')j'\rangle \qquad (11.5.17)
\end{aligned}
$$

其中约化矩阵元为

$$
\begin{aligned}
&\langle (j_1j_2)j \| [T^{k_1}(1)T^{k_2}(2)] \| (j_1'j_2')j'\rangle \\
&= [(2j'+1)(2j+1)(2k+1)]^{1/2}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j_1' & j_2' & j' \\ k_1 & k_2 & k \end{Bmatrix}\langle j_1 \| T^{k_1} \| j_1'\rangle\langle j_2 \| T^{k_2} \| j_2'\rangle
\end{aligned}
$$

(11.5.18)

通常称(11.5.17)和(11.5.18)式为耦合张量算子的 W-E 定理.

(11.5.18)式很好证明，只须把耦合基矢和耦合张量算子展开，得到

$$
\begin{aligned}
&\langle (j_1j_2)jm \mid [T(1)^{k_1}T^{k_2}(2)]^k_q \mid (j_1'j_2')j'm'\rangle \\
&= \sum_{m_1m_2}\sum_{m_1'm_2'}\sum_{q_1q_2}(j_1j_2, m_1m_2 \mid jm)(j_1'j_2', m_1'm_2' \mid j'm')(k_1k_2, q_1q_2 \mid kq) \\
&\quad \cdot \langle j_1m_1 \mid T^{k_1}_{q_1} \mid j_1'm_1'\rangle\langle j_2m_2 \mid T^{k_2}_{q_2} \mid j_2'm_2'\rangle \\
&= [(2j+1)(2j'+1)(2k+1)]^{1/2}\sum_{m_1m_2m_1'm_2'}\sum_{q_1q_2}(-1)^{j_1-j_2-m+j_1'-j_2'-m'+k_1-k_2-q} \\
&\quad \cdot \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1' & j_2' & j' \\ m_1' & m_2' & -m' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} \\
&\quad \cdot (-1)^{j_1-m_1}\begin{pmatrix} j_1 & k_1 & j_1' \\ -m_1 & q_1 & m_1' \end{pmatrix}(-1)^{j_2-m_2}\begin{pmatrix} j_2 & k_2 & j_2' \\ -m_2 & q_2 & m_2' \end{pmatrix} \\
&\quad \cdot \langle j_1 \| T^{k_1} \| j_1'\rangle\langle j_2 \| T^{k_2} \| j_2'\rangle \qquad (11.5.19)
\end{aligned}
$$

(11.5.19)式与(11.5.17)式是相同的，因而把(11.5.19)式与(11.5.17)式相等起来，然后两端均乘以$(-1)^{j-m}\begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix}$并对 $m_1m_1'q$ 求和，注意到

$$
\sum_{mm'q'}\begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} = 1
$$

经过相因子整理后，得到

$$
\begin{aligned}
&\langle (j_1j_2)j \| [T^{k_1}(1)T^{k_2}(2)] \| (j_1'j_2')j'\rangle \\
&= [(2j+1)(2j'+1)(2k+1)]^{1/2}\langle j_1 \| T^{k_1} \| j_1'\rangle\langle j_2 \| T^{k_2} \| j_2'\rangle \\
&\quad \cdot \sum_{m_1m_2m_1'm_2'}\sum_{q_1q_2}\sum_{mm'q}(-)^{2j_1+j_1'-j_2'+k_1+k_2}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1' & j_2' & j' \\ m_1' & m_2' & -m' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} \\
&\quad \cdot \begin{pmatrix} j_2 & k_2 & j_2' \\ -m_2 & q_2 & m_2' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

其中对 6 个 3-j 符号的求和正如是 9-j 符号，即

$$\sum_{m_1m_2m_1'm_2'q_1q_2mm'q}\cdots=\begin{Bmatrix}j_1 & j_2 & j\\ j_1' & j_2' & j'\\ k_1 & k_2 & k\end{Bmatrix}$$

这就证明了(11.5.18)式.

耦合不可约张量算子矩阵元的一个特例是 $T^{k(1)}T^{k(2)}$ 的矩阵元，此时

$$\begin{aligned}&\langle (j_1j_2)jm \mid T^{k(1)}T^{k(2)} \mid (j_1'j_2')j'm\rangle\\ &=\sqrt{2k+1}\langle (j_1j_2)jm \mid [T^kT^k]_0^0 \mid (j_1'j_2')j'm'\rangle\\ &=(-1)^{j-m}\begin{pmatrix} j & 0 & j\\ -m & 0 & m'\end{pmatrix}\sqrt{2k+1}\langle (j_1j_2)j \| [T^kT^k]^0 \| (j_1'j_2')j'\rangle\\ &=\frac{1}{\sqrt{2j+1}}\delta_{mm'}\sqrt{2k+1}\langle (j_1j_2)j \| [T^kT^k]^0 \| (j_1'j_2')j'\rangle\end{aligned}$$

约化矩阵元

$$\begin{aligned}&\langle (j_1j_2)j \| [T^kT^k]^0 \| (j_1'j_2')j'\rangle\\ &=\sqrt{(2j+1)(2j'+1)}\begin{Bmatrix}j_1 & j_2 & j\\ j_1' & j_2' & j'\\ k & k & 0\end{Bmatrix}\langle j_1 \| T^k \| j_1'\rangle\langle j_2 \| T^k \| j_2'\rangle\begin{Bmatrix}j_1 & j_2 & j\\ j_1' & j_2' & j'\\ k & k & 0\end{Bmatrix}\\ &=\delta_{jj'}(-1)^{j_1'+j_2+j+k}\frac{1}{\sqrt{(2j+1)(2k+1)}}\begin{Bmatrix}j_2 & j_2' & k\\ j_1' & j_1 & j\end{Bmatrix}\end{aligned}$$

因而

$$\begin{aligned}&\langle (j_1j_2)j \| [T^kT^k]^0 \| (j_1'j_2')j'\rangle\\ &=\delta_{jj'}(-1)^{j_1'+j_2+j+k}\sqrt{\frac{2j+1}{2k+1}}\begin{Bmatrix}j_2 & j_2' & k\\ j_1' & j_1 & j\end{Bmatrix}\langle j_1 \| T^k \| j_1'\rangle\langle j_2 \| T^k \| j_2'\rangle\end{aligned}$$

即矩阵元

$$\begin{aligned}&\langle (j_1j_2)jm \mid T_{(1)}^kT_{(1)}^k \mid (j_1'j_2')j'm'\rangle\\ &=\delta_{mm'}\delta_{jj'}(-1)^{j_1'+j_2+j+k}\begin{Bmatrix}j_2 & j_2' & k\\ j_1' & j_1 & j\end{Bmatrix}\langle j_1 \| T^k \| j_1'\rangle\langle j_2 \| T^k \| j_2'\rangle \qquad (11.5.20)\end{aligned}$$

11.5.3 不可约张量算子矩阵元的选择定则

对于 $SO(3)$ 群不可约张量算子 T_q^k 的矩阵元

$$\langle jm|T_q^k|j'm'\rangle$$

不为零的条件，存在如下的选择定则(selection rules).

选择定则 矩阵元 $\langle jm|T_q^k|j'm'\rangle$ 只有当不可约表示直积满足条件

$$D^{(k)}\otimes D^{(j')}\otimes D^{(j)*}\ni D^{(0)} \qquad (11.5.21)$$

时，这个矩阵元才不为零.

证明　利用群算子 $\hat{P}(R)$ 作用 $T_q^k|j'm'\rangle$ 得到

$$\hat{P}(R)T_q^k|j'm'\rangle = \hat{P}(R)T_q^k\hat{P}(R)^{-1}\hat{P}(R)|j'm'\rangle = \sum_{q'm''} D^{(k)}(R)_{q'q}D^{(j')}(R)_{m''m'}T_{q'}^k|j'm''\rangle$$

这说明 $T_q^k|j'm'\rangle$ 是按直积表示 $D^{(k)}\otimes D^{(j')}$ 变换的基矢. 因而只有在直积分解

$$D^{(k)}\otimes D^{(j')} = \sum_{\nu}\oplus(\nu|k,j')D^{(\nu)}$$

中包括的不可约表示 $D^{(j)}$ 时，上述矩阵元才不为零. 而在直积 $D^{(k)}\otimes D^{(j')}$ 中 $D^{(\nu)}$ 出现的次数 $(\nu_1|kj')$ 为

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2\pi}\int\chi^{(k)}(\varphi)\chi^{(j')}(\varphi)\chi^{(j)*}(\varphi)(1-\cos\varphi)\mathrm{d}\varphi \\
&= \sum_{\nu}\oplus(\nu_1|k,j')\frac{1}{\pi}\int\chi^{(\nu)}(\varphi)\chi^{(j)*}(\varphi)(1-\cos\varphi)\mathrm{d}\varphi \\
&= \sum_{\nu}\oplus(\nu|k,j')\delta_{\nu j} = (j|k,j') = 1
\end{aligned}$$

$SO(3)$ 群直积分解没有重复出现 $(\nu_1|k,j')$，只能为 0 或 1，而只有不可约表示 $D^{(0)}=1$，即

$$\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}(1-\cos\varphi)D^{(0)}\mathrm{d}\varphi = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}(1-\cos\varphi)\mathrm{d}\varphi = 1$$

从而证明了这一定则.

这一选择定则可推广到一切群 G，只须把不可约表示 $D^{(0)}$ 改为恒等表示 A.

在讨论光谱选择定则时，将看到这种选择定则的具体应用.

11.6　$SO(3)$ 群与其分立子群(点群)的关系

在第三章已指出全部点群 $\bar{G}$ 都是 $O(3)$ 群的分立子群，即

$$O(3)\supset\bar{G}$$

而 $O(3)=SO(3)\otimes I$. $SO(3)$ 群的分立子群为第一类点群 G，即 $SO(3)\supset G$，而全部点群 $\bar{G}$ 中除第一类点群 G 之外，只有两种类型的第二类点群，即 $G\otimes I$ 和 $H\cup H^+$，$H\cup H^+$ 中 H 为第一类点群 G 中指数为 2 的不变子群，H^+ 为 i 与 H 的陪集之积，即 $H^+=i(G-H)$ 这种第二类点群与第一类点群 G 同构. 从群论的观点看，$H\cup H^+$ 群和与之同构的第一类点群 G 是完全相同的. 因而讨论 $O(3)$ 群与其子群点群的关系，只须讨论 $SO(3)$ 群与其子群第一类点群的关系.

11.6.1　$SO(3)$ 群不可约表示 (l) 向子群 G 的不可约表示 (Γ) 的分解

如果点群 G 为 $SO(3)$ 群的子群，$SO(3)$ 群不可约表示 (l) 当只取子群 G 的元素时构成子群 G 的分导表示. 但是子群 G 的这种分导表示并不是不可约的，而是可约的，它可约化为 G 的不可约表示的直和，即

$$D^{(l)} = \sum_{\Gamma} \oplus a_{\Gamma}^{l} D^{(\Gamma)} \tag{11.6.1}$$

a_{Γ}^{l} 为 $SO(3)$ 群不可约表示(l)向子群不可约表示分解时，不可约表示(Γ)出现的重复度，由第一章讨论的群到子群不可约表示分解理论，可得到

$$a_{\Gamma}^{l} = n_G \sum_{R \in G} \chi^{(l)}(R) \chi^{(\Gamma)}(R)^{*} \tag{11.6.2}$$

$SO(3)$ 群不可约表示 l 的特征标为

$$\chi^{(l)}(\varphi) = \frac{\sin\left(l + \frac{1}{2}\right)\varphi}{\sin \frac{\varphi}{2}} \tag{11.6.3}$$

因点群 G 的特征标是完全知道的(见第三章)，于是可由(11.6.2)式求出重复度 a_{Γ}^{l}. 如对于 O 群，下表中给出了部分常用的(l)的不可约表示分解表.

$SO(3)$ 群不可约表示(l)	O 群不可约表示(Γ)
0	A_1
1	T_1
2	$E + T_2$
3	$A_2 + T_1 + T_2$
4	$A_1 + E + T_1 + T_2$
5	$E + 2T_1 + T_2$
6	$A_1 + A_2 + E + T_1 + 2T_2$

$SO(3)$ 群不可约表示(l)的标准化基矢为 $\{Y_m^l(\theta, \varphi), m = -l, -l+1, \cdots, l\}$，因而由它们的线性组合可构成($l$)中所包括的子群 G 的各种不可约表示的基矢，即

$$\Psi_{\Gamma\gamma}^{l} = \sum_{m} S_{m,\Gamma\gamma}^{l} Y_m^l \tag{11.6.4}$$

其中线性组合系数 $S_{m,\Gamma\gamma}^{l}$ 可由如下方法得到.

定义投影算子 $\hat{e}_{\gamma\gamma'}^{\Gamma}$ 为

$$\hat{e}_{\gamma\gamma'}^{\Gamma} = \frac{\lambda(\Gamma)}{n_G} \sum_{R \in G} D_{\gamma'\gamma}^{(\Gamma)}(R)^{-1} \hat{P}(R) = \frac{\lambda(\Gamma)}{n_G} \sum_{R \in G} D_{\gamma\gamma'}^{(\Gamma)}(R)^{*} \hat{P}(R) \tag{11.6.5}$$

其中 $\lambda(\Gamma)$ 为 G 群不可约表示(Γ)的维数，n_G 为群 G 的阶，$\hat{P}(R)$ 为对应 G 群元素 R 的群算子，$D_{\gamma'\gamma}^{(\Gamma)}(R)$ 为群 G 不可约酉表示(Γ)的表示矩阵，此时 $D_{\gamma'\gamma}^{(\Gamma)}(R)^{-1} = D_{\gamma'\gamma}^{(\Gamma)}(R)^{*}$ $\hat{e}_{\gamma\gamma'}^{\Gamma}$ 作用任何函数 Ψ，则

$$\hat{e}_{\gamma\gamma'}^{\Gamma} \Psi = \Psi_{\Gamma\gamma} \tag{11.6.6}$$

当 $\Psi_{\Gamma\gamma} \neq 0$ 时，就是 G 群不可约表示(Γ)的基矢 $\Psi_{\Gamma\gamma}$. 下面证明这一点.

用群算子 $\hat{P}(S)$ 作用(11.6.6)式为

$$\hat{P}(S)\Psi_{\Gamma\gamma} = \hat{P}(S)\left(\frac{\lambda(\Gamma)}{n_G} \sum_{R} D_{\gamma\gamma'}^{(\Gamma)}(R)^{*} \hat{P}(R)\Psi\right)$$

$$= \hat{P}(S) \frac{\lambda(\Gamma)}{n_G} \sum_{R} D_{\gamma\gamma'}^{(\Gamma)}(S^{-1}R)^{*} \hat{P}(R)\Psi$$

$$= \hat{P}(S)\frac{\lambda(\Gamma)}{n_G}\sum_{\mu}\sum_{R}D_{\gamma\mu}^{(\Gamma)}(S^{-1})^* D_{\mu\gamma}^{(\Gamma)}(S^{-1})^*\hat{P}(S')\hat{P}(S)\Psi$$

$$= \sum_{\mu}D_{\mu\gamma}^{(\Gamma)}(S)\left(\frac{\lambda\Gamma}{n_G}\sum_{R}D_{\mu\gamma}^{(\Gamma)}(R)^*\hat{P}(R)\Psi\right)$$

$$= \sum_{\mu}D_{\mu\gamma}^{(\Gamma)}(S)\Psi_{\Gamma\mu} \tag{11.6.7}$$

这就证明了(11.6.7)式给出的 $\Psi_{\Gamma\gamma}$ 为 G 群不可约表示(Γ)的基矢.

如果取 Ψ 为 $SO(3)$ 群不可约表示 l 的基 Y_l^m，则

$$\Psi_{\Gamma\gamma}^{(l)} = \hat{e}_{\gamma\gamma'}^{\Gamma}Y_m^{(l)} = \frac{\lambda(\Gamma)}{n_G}\sum_{R}D_{\gamma\gamma}^{(\Gamma)}(R)^*\hat{P}(R)Y_m^l \tag{11.6.8}$$

就得到了由不可约(l)的基矢$\{Y_m^l\}$组合成的基矢 $\Psi_{\Gamma\gamma}^{(l)}$，把

$$\hat{P}(R)Y_m^l = \sum_{M'}D_{mm'}^{(l)}(R)Y_{m'}^{(l)}$$

代入(11.6.8)式得到

$$Y_{\Gamma\gamma}^l = \frac{\lambda(\Gamma)}{n_G}\sum_{R}\sum_{M'}D_{\gamma\gamma}^{(\Gamma)}(R)^* D_{m'm}^{(l)}(R)Y_{m'}^l \tag{11.6.9}$$

与(11.6.4)式相比较，得到

$$S_{m,\Gamma\gamma}^l \backsim \frac{\lambda(\Gamma)}{n_G}\sum_{R}D_{\gamma\gamma}^{(\Gamma)}(R)^* D_{m'm}^{(l)}(R) \tag{11.6.10}$$

上式两端可以差一个相因子，这个相因子通常由基矢的归一化条件决定，通常取 $|S_{m,\Gamma\gamma}^l| = 1$. 并使(11.6.10)式取等号. 由酉矩阵性质，由(11.6.10)式可得到

$$S_{m,\Gamma\gamma}^{l*} = (-1)^{l-m}[-1]^{\Gamma-\gamma}S_{\bar{m},\Gamma\bar{\gamma}}^{1} \tag{11.6.11}$$

其中相因子$[-1]^{\Gamma-\gamma}$在第三章已进行了讨论. 在唐敖庆等人的专著“配位场理论方法”中给出了常用 S 系数的表.

11.6.2　$SO(3)$ 点群的群间耦合系数

上节给出的基矢 $Y_{\Gamma\gamma}^{(l)}$ 是 $SO(3)\supset G$ 的共同不可约表示基矢，对 G 群它的不可约表示为(p)，对 $SO(3)$ 群为不可约表示(l). 因而由它们也可耦合成 $SO(3)\supset G$ 的共同不可约表示的基矢，为此定义广义 C-G 系数$(l_1\Gamma_1,\ l_2\Gamma_2;\ \gamma_1\gamma_2|l_3\Gamma_3,\ \gamma_3)$，即

$$[\Psi_{\Gamma_1}^{l_1}\Psi_{\Gamma_2}^{l_2}]_{\Gamma_3\gamma}^{l_3} = \sum_{\Gamma_1\Gamma_2\gamma_1\gamma_2}(l_1\Gamma_1,\ l_2\Gamma_2;\ \gamma_1\gamma_2 \mid l_3\Gamma_3,\ \gamma_3)\Psi_{\Gamma_1\gamma_1}^{l_1}\Psi_{\Gamma_2\gamma_2}^{l_2} \tag{11.6.12}$$

这种耦合是由两步构成的，即先把 $\Psi_{\Gamma_1\gamma_1}^{l_1}$ 与 $\Psi_{\Gamma_2\gamma_2}^{l_2}$ 利用第三章讨论的点群 C-G 系数$(\Gamma_1\gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2|\Gamma_3\gamma_3)$耦合为点群 G 的不可约表示 Γ_3 的基矢，即

$$[\Psi_{\Gamma_1\gamma_1}^{l_1}\Psi_{\Gamma_2\gamma_2}^{l_2}]_{\Gamma_3\gamma_3} = \sum_{\gamma_1\gamma_2}(\Gamma_1\gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2 \mid \Gamma_3\gamma_3)\Psi_{\Gamma_1\gamma_1}^{l_1}\Psi_{\Gamma_2\gamma_2}^{l_2}\Psi_{\Gamma_1\gamma_1}^{l_1}\Psi_{\Gamma_2\gamma_2}^{l_2}$$

然后由群间耦合系数$(l_1\Gamma_1,\ l_2\Gamma_2|l_3\Gamma_3)$耦合为 $SO(3)$ 群不可约表示(l_3)的基矢，即

$$[\Psi^{l_1}\Psi^{l_2}]_{\Gamma_3\gamma_3}^{l_3} = \sum_{\Gamma_1\Gamma_2}(l_1\Gamma_1,\ l_2\Gamma_2 \mid l_3\Gamma_3)[\Psi_{\Gamma_1}^{l_1}\Psi_{\Gamma_2}^{l_2}]_{\Gamma_3\gamma_3}^{l_3}$$

$$= \sum_{\Gamma_1\Gamma_2}\sum_{\gamma_1\gamma_2}(l_1\Gamma_1,\ l_2\Gamma_2 \mid l_3\Gamma_3)(\Gamma_1\Gamma_2,\ \gamma_1\gamma_2 \mid \Gamma_3\gamma_3) \tag{11.6.13}$$

称$(l_1\Gamma_1,\ l_2\Gamma_2|l_3\Gamma_3)$为 $SO(3)$-G 的群间耦合系数.

由于$SO(3)$群不可约表示(l)向子群G不可约表示分解有重复出现问题，即$a_{\Gamma}^{l}>1$的情况，因而在定义群间耦合系数$(l_1\Gamma_1,\ l_2\Gamma_2|l_3\Gamma_3)_i$时要考虑这种情况，而定义为$(l_1\Gamma_{1a},\ l_2\Gamma_{2b}|l_3\Gamma_{3c})$，其中$a$，$b$，$c$为$l_1$，$l_2$或$l_3$向点群分解时出现的$\Gamma_1$，$\Gamma_2$，$\Gamma_3$中的第$a$个$\Gamma_1$（记为$\Gamma_{1a}$），第$b$个$\Gamma_2$（记为$\Gamma_{2b}$）和第$c$个$\Gamma_3$（记为$\Gamma_{3c}$）. i表示$\Gamma_1\otimes\Gamma_2$时出现的重复度.

由具体计算可得到群间耦合系数$(l_1\Gamma_{1a},\ l_2\Gamma_{2b}|l_3\Gamma_{3c})$的表达式为

$$(l_1\Gamma_{1a},\ l_2\Gamma_{2b}\mid l_3\Gamma_{3c})_i=\sum_{m_1m_2m_3}\sum_{r_1r_2r_3}\sqrt{\lambda(\Gamma_3)(2l_3+1)}(-1)^{l_1+l_2+l_3}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \cdot V\begin{pmatrix} \Gamma_1 & \Gamma_2 & \Gamma_3 \\ r_1 & r_2 & r_3 \end{pmatrix}_i^{*} S_{m_1,\ \Gamma_1r_1}^{l_1 *}S_{m_2,\ \Gamma_2r_2}^{l_2 *}S_{m_3,\ \Gamma_3r_3}^{l_3 *} \tag{11.6.14}$$

由于耦合基矢是正交归一化的，因而群间耦合系数具有正交归一性，即

$$\begin{cases} \sum\limits_{i\Gamma_1\Gamma_2ab}(l_1\Gamma_{1a},\ l_2\Gamma_{2b}\mid l_3\Gamma_{3c})_i(l_1\Gamma_{1a},\ l_2\Gamma_{2b}\mid l_3'\Gamma_{3c'})_i^{*}=\delta_{cc'}\delta_{j_3j_3'} \\ \sum\limits_{il_3c'}(l_1\Gamma_{1a},\ l_2\Gamma_{2b}\mid l_3\Gamma_{3c})(l_1\Gamma_{1a'}',\ l_2\Gamma_{2b'}'\mid l_3\Gamma_{3c})_3^{*}=\delta_{\Gamma_1\Gamma_1'}\delta_{\Gamma_2\Gamma_2'}\delta_{aa'}\delta_{bb'} \end{cases} \tag{11.6.15}$$

为了揭示群间耦合系数的对称性，定义V系数，即令

$$V\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ \Gamma_{1a} & \Gamma_{2b} & \Gamma_{3c} \end{pmatrix}_i=\sqrt{\frac{\lambda(\sqrt{3})}{2l_3+1}}(l_1\Gamma_{1a},\ l_2\Gamma_{2b}|l_3\Gamma_{3c})_i \tag{11.5.16}$$

这种V系数具有很好的列置换对称性.

定义了这些耦合系数就把讨论只具有点群对称性的分子问题与连续群$SO(3)$联系起来了，因而为使用连续群理论讨论分子问题架起了桥梁，这对理论化学是很重要的. 唐敖庆与物质结构讨论班的正式成员在上世纪60年代末在这方面得到了一系列科研成果（见“配位场理论方法”）.

第十二章　典型紧致 Lie 代数的不可约表示

典型 Lie 代数 A_n, B_n, C_n, D_n 的紧致实形分别为 Lie 代数 $su(n+1)$, $o(2n+1)$, $sp(2n)$(或 $usp(2n)$) 和 $o(2n)$, 以它们为无穷小生成元的 Lie 群为 $SU(n+1)$, $O(2n+1)$, $Sp(2n)$和 $O(2n)$, 这些群通常称为典型群. 它们在物理学和化学中有很多重要的应用. 本章首先利用不可约张量方法讨论它们的不可约表示: $U(n)$群用 Young 图 $[\Lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$标记它的不可约表示, $O(2n+1)$和 $O(2n)$用无迹张量$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$标记它们的不可约表示, $Sp(2n)$群用斜无迹张量$\langle\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n\rangle$标记它的不可约表示. 这些不可约表示的不可约张量都具有相关 Young 所标记的置换对称性. 然后用 Lie 代数方法证明了这些 Young 图, 实际上就是标记不可约表示的最高权在自然基$(e_1, e_2, \cdots, e_n)$中的分量, 并讨论了这些 Lie 群的特征标和不可约表示的维数. 最后简要讨论 $U(n)$群到子群 $O(n)$和 $Sp(n)$的不可约表示分解.

12.1　$U(n)$群和 $SU(n)$群的不可约表示与不可约张量方法

$U(n)$和 $SU(n)$群都是紧致 Lie 群, 而且也是 n 维空间的线性变换群, 研究它们的不可约表示问题, 可用 Lie 代数方法, 也可用 m 秩张量空间中不可约张量方法. 后者几何图像清晰, 概念直观. 而 Lie 代数方法由于可利用微积分方法, 可得到若干不可约张量方法得不到或难于得到的结果. 在本节中用不可约张量方法讨论 $U(n)$和 $SU(n)$群的不可约表示问题. 下节将简要用 Lie 代数方法对它们的不可约表示问题再进一步进行一些讨论.

12.1.1　$U(n)$群变换下的张量和张量空间

对于 n 维向量空间, 可由一般线性变换群 $GL(n)$定义 m 秩(rank)的协变张量(covarint tensor)、逆变张量(contravarian tensor)和混合张量. 从而建立 $GL(n)$群的三种类型的不可约表示. 但是对于 $GL(n)$群的子群 $U(n)$, $GL(n)$群的不可约表示对子群 $U(n)$仍然是不可约的, 而且 $GL(n)$群协变张量, 逆变张量和混合张量建立起的不可约表示, 对于子群 $U(n)$群都是等价的不可约表示. 而在物理学和化学中最有用的群是 $U(n)$群, 一般都不使用 $GL(n)$群, 因而在本节中利用不可约张量方法, 建立 $U(n)$群及其子群 $SU(n)$群的不可约表示.

1. n 维向量空间与 $U(n)$群

n 维向量空间 V_n, 当建立一组正交归一化基矢$(e_1, e_2, \cdots, e_n)$之后, 空间中任一向量 F 可表示为

$$F^{(1)} = \sum_{i=1}^{n} f_i e_i = (f_1, f_2, \cdots, f_n)\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix}$$

对于固定的基矢$(e_1, e_2, \cdots, e_n)$，作用于 n 维空间的酉变换表现为 $n\times n$ 的酉矩阵，即

$$u = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ u_{1n} & u_{n2} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

满足酉矩阵条件的全部酉矩阵构成 $U(n)$ 群，即

$$U(n) = \{u \mid u^+ u = uu^+ = E\}$$

E 为 $n\times n$ 单位矩阵. 酉矩阵作用于空间向量 F，为

$$uF^{[1]} = (f_1, f_2, \cdots, f_n)u\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = (f_1', f_2', \cdots, f_n')u\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = F^{[1]'}$$

$$f_i' = \sum_j u_{ji} f_j, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

这表明 n 维向量空间 V_n 构成 $U(n)$ 群的不可约表示空间，记为[1]，或用图形记为□.

2. m 秩张量与张量空间

1° V_n 的直积空间

$V_n^{\otimes 2}$ 向量空间 V_n 的直积空间

$$V_n \otimes V_n = V_n^{\otimes 2}$$

是 n^2 维的向量空间，基矢为$\{e_i e_j,\ i,j = 1, 2, \cdots, n\}$，其中向量为

$$F^{[2]} = \sum_{ij} f_{ij} e_i e_j$$

$F^{(2)}$有 n^2 个分量f_{ij}，$i,j = 1, 2, \cdots, n$.

它们构成 $U(n)$ 群的直积表示，即

$$\hat{P}(u)F^{[2]} = F^{[2]'}$$

分量形式为

$$\hat{P}(u) f_{i,j} = \sum_{i'j'} u_{i'i} u_{j'j} f_{i'j'}$$

$\hat{P}(u)$为 $U(n)$ 群元素 u 作用于直积空间的算子. 这种直积表示对 $U(n)$ 群是可约表示.

我们称空间 $V_n^{\otimes 2}$ 为 2 秩张量空间，空间元素为二秩张量 $F^{[2]}$，它有 n^2 个分量f_{ij}.

2° m 秩张量空间与 $U(n)$ 群的 m 重直积表示

把向量空间 V_n 的直积空间 $V_n^{\otimes 2}$，推广到 m 次直积空间，即

$$\underbrace{V_n \otimes V_n \otimes \cdots \otimes V_n}_{m} = V_n^{\otimes m}$$

空间 $V_n^{\otimes m}$ 是 n^m 维的，基矢为 $\{e_{i_1}e_{i_2}\cdots e_{i_m}, i_1, i_2, \cdots, i_m=1, 2, \cdots, n\}$，其中元素 $F^{[m]}$ 有 n^m 个分量，即

$$F^{[m]} = \sum_{i_1, i_2, \cdots, i_m} f_{i_1, i_2, \cdots, i_m} e_{i_1} e_{i_2} \cdots e_{i_m}$$

称为 m 秩张量空间，每个 m 秩张量 $F^{[m]}$ 有 n^m 个分量 $f_{i_1, i_2, \cdots, i_m}$.

m 秩张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 荷载了 $U(n)$ 群的重直积表示，即

$$[1]\otimes[1]\otimes\cdots\otimes[1] \quad 或 \quad \square\otimes\square\otimes\cdots\otimes\square$$

$U(n)$ 群算子 $\hat{P}(u)$ 作用于 m 秩张量为

$$\hat{P}(u)F^{[m]} = F^{[m]'}$$

分量形成为

$$\hat{P}(u)f_{i_1, i_2, \cdots, i_m} = \sum_{i'_1, i'_2 \cdots i'_m} u_{i'_1 i_1} u_{i'_2 i_2} \cdots u_{i'_m i_m} f_{i'_1 i'_2 \cdots i'_m}$$

寻求 $U(n)$ 群的不可约表示问题，可归结为把这些直积表示分解为不可约表示的直和.

12.1.2　张量空间的约化与不可约张量

1. 张量脚标的置换群 S_m 与 $U(n)$ 群的关系

m 秩张量的 n^m 个分量都有 m 个脚标 $i_1 i_2 \cdots i_m$，可对这些脚标定义置换群 S_m，它的元素

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & m \\ \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 & \cdots & \sigma_m \end{pmatrix}$$

即把 $1\to\sigma_1$，$2\to\sigma_2$，$m\to\sigma_m$. 置换群元素 σ 作用于 n_m 秩张量定义为

$$\sigma f_{i_1, i_2, \cdots, i_m} = f_{i_{\sigma_1}, i_{\sigma_2} \cdots i_{\sigma_m}} \tag{12.1.1}$$

下面证明一个重要的定理.

定理 12.1.1　置换群 S_m 的任一元素 σ 和 $U(n)$ 群的任一元素 u 对任一 m 秩张量 $F^{[m]}$ 的作用都是可交换的，即

$$\sigma\hat{P}(u)F^{[m]} = \hat{P}(u)\sigma F^{[m]} \tag{12.1.2}$$

证明　按定义

$$\sigma f_{i_1, i_2, \cdots, i_m} = f_{i_{\sigma_1}, i_{\sigma_2} \cdots i_{\sigma_m}}$$

用 $\hat{P}(u)$ 作用上式，得

$$\begin{aligned} &\hat{P}(u)\sigma f_{i_1, i_2, \cdots, i_m} \\ &= \hat{P}(u) f_{i_{\sigma_1}, i_{\sigma_2}, \cdots, i_{\sigma_m}} \\ &= \sum_{i'_1, i'_2 \cdots i'_m} u_{i'_{\sigma_1} i'_{\sigma_2}} u_{i_{\sigma_2} i'_{\sigma_2}} \cdots u_{i'_{\sigma_m} i'_{\sigma_m}} f_{i'_{\sigma_1} i'_{\sigma_2} \cdots i'_{\sigma_m}} \end{aligned}$$

容易看到

$$u_{i'_{\sigma_1} i_{\sigma_2}} u_{i'_{\sigma_2} i_{\sigma_2}} \cdots u_{i'_{\sigma_m} i_{\sigma_m}} = u_{i'_1 i_1} u_{i'_2 i_2} \cdots u_{i'_m i_m}$$

等式两端只是矩阵元 $u_{i'_k i_k}$ 的顺序按 $\sigma=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & m\\ \sigma_1 & \sigma_2 & \cdots & \sigma_m\end{pmatrix}$ 发生了变化，矩阵元本身是个数，数的乘法是服从交换律的．因而

$$\hat{P}(u)\sigma f_{i_1,i_2,\cdots,i_m} = \sum_{i'_1,i'_2\cdots i'_m} u_{i'_1 i'_1} u_{i'_2 i_2}\cdots u_{i'_m i_m} f_{i'_{\sigma_1} i'_{\sigma_2}\cdots i'_{\sigma_m}} \tag{12.1.3}$$

另一方面

$$\hat{P}(u) f_{i_1,i_2,\cdots,i_m} = \sum_{i'_1,i'_2\cdots i'_m} u_{i'_1 i_1} u_{i'_2 i_2}\cdots u_{i'_m i_m} f_{i'_1 i'_2\cdots i'_m}$$

用 σ 作用上式，得

$$\sigma\hat{P}(u) f_{i_1,i_2,\cdots,i_m} = \sum_{i'_1,i'_2\cdots i'_m} u_{i'_1 i_{\sigma_1}} u_{i'_m i_{\sigma_2}}\cdots u_{i'_m i_{\sigma_m}} f_{i'_1 i'_2\cdots i'_m}$$

因为 i'_1，$i'_2\cdots i'_m$ 是求和脚标，可以把它们写为 $i_{\sigma'_k}$，(i'_k 从 1，2，…，n 求和，变为 $i_{\sigma'_k}$ 之后也是从 1，2，…，n 求和)．因而上式为

$$\begin{aligned}\sigma\hat{P}(u) f_{i_1,i_2,\cdots,i_m} &= \sum_{i'_1,i'_2\cdots i'_m} u_{i'_{\sigma_1} i'_{\sigma_1}} u_{i'_{\sigma_2} i_{\sigma_2}}\cdots u_{i'_{\sigma_m} i_{\sigma_m}} f_{i'_{\sigma_1} i'_{\sigma_2}\cdots i'_{\sigma_m}}\\ &= \sum_{i'_1,i'_2\cdots i'_m} u_{i'_1 i_1} u_{i'_2 i_2}\cdots u_{i'_m i_m} f_{i'_{\sigma_1} i'_{\sigma_2}\cdots i'_{\sigma_m}}\end{aligned} \tag{12.1.4}$$

因此就证明了定理．

在置换群 S_m 与 $U(n)$ 群作用于 m 秩张量上的这种相互可交换的关系的基础上，就可利用置换群把 m 秩张量分为按脚标置换的一定的对称类型，把它们约化为特定对称类型的不可约张量．

2．二秩张量的不可约形式

置换群 S_2 存在两种不可约表示，即对称表示[2]式 Young 图 $\boxed{}\boxed{}$ 和反对称表示[1，1]式 Young 图 $\begin{smallmatrix}\boxed{}\\ \boxed{}\end{smallmatrix}$，对称表示的 Young 算子为

$$\hat{Y}^{[2]}=E+(1,2)$$

反对称表示的 Young 算子为

$$\hat{Y}^{[1]}=E-(1,2)$$

E 为 S_2 群的单位元，用它们把二秩张量分为对于脚标置换是对称的张量和反对称张量，即

$$f_{\boxed{i_1}\boxed{i_2}}=\hat{Y}^{[2]}f_{i_1 i_2}=f_{i_1 i_2}+f_{i_2 i_1}$$

反对称张量为

$$f_{\begin{smallmatrix}\boxed{i_1}\\ \boxed{i_2}\end{smallmatrix}}=\hat{Y}^{[1]}f_{i_1 i_2}=f_{i_1 i_2}-f_{i_2 i_1}$$

这种具有一定对称类型的张量用相应 Young 图在其中填充上 i_1，i_2，…表示．一般称这种类似于 Young 盘的图形为 Wely 盘．当 $n=2$ 时，S_2 的 Young 图只有 $\boxed{}\boxed{}$ 和 $\begin{smallmatrix}\boxed{}\\ \boxed{}\end{smallmatrix}$ 两种，它的 Young 盘只有 $\boxed{1}\boxed{2}$，$\boxed{2}\boxed{1}$，$\begin{smallmatrix}\boxed{1}\\ \boxed{2}\end{smallmatrix}$，$\begin{smallmatrix}\boxed{2}\\ \boxed{1}\end{smallmatrix}$ 四种(其中 $\boxed{2}\boxed{1}$ 和 $\begin{smallmatrix}\boxed{2}\\ \boxed{1}\end{smallmatrix}$ 是外标准 Young 盘)．

而 Weyl 盘则不同，如 $\boxed{i_1}\boxed{i_2}$ 和 $\begin{array}{|c|}\hline i_1 \\ \hline i_2 \\ \hline\end{array}$（其中 $i_1=1, 2, \cdots, n$；$i_2=1, 2, \cdots, n$），因而 Weyl 盘的数目就很多了.

容易看到这种具有一定对称类型的张量对 $U(n)$ 群构成了不变子空间，因而它们荷载了 $U(n)$ 群的不可约表示，称为 $U(n)$ 群的不可约张量. 比如

$$\begin{aligned}\hat{P}(u)f_{\boxed{i_1}\boxed{i_2}} &= \hat{P}(u)(E+(1,2))f_{i_1i_2} \\ &= [E+(1,2)]\hat{P}(u)f_{i_1i_2} \\ &= \sum_{i_1'i_2'}[E+(1,2)]u_{i_1'i_1}u_{i_2'i_2}f_{i_1'i_2'} \\ &= \sum_{i_1'i_2'}u_{i_1'i_1}u_{i_2'i_2}f_{\boxed{i_1'}\boxed{i_2'}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{P}(u)f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1 \\ \hline i_2 \\ \hline\end{array}} &= \sum_{i_1'i_2'}[E-(1,2)]u_{i_1'i_1}u_{i_2'i_2}f_{i_1'i_2'} \\ &= \sum_{i_1'i_2'}u_{i_1'i_1}u_{i_2'i_2}f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1' \\ \hline i_2' \\ \hline\end{array}}\end{aligned}$$

对称张量构成的子空间的维数为 $\binom{n+1}{2}=\frac{n(n+1)}{2}$，反对称张量构成的子空间的维数为 $\binom{n}{2}=\frac{n(n-1)}{2}$，它们的维数之和为 $V_n^{\otimes 2}$ 的维数 n^2.

对称张量 $f_{\boxed{i_1}\boxed{i_2}}=f_{\boxed{i_2}\boxed{i_1}}$，因而在 Weyl 盘中填充 1, 2, …, n 必须保证 $i_1\leqslant i_2$，才能得到独立的张量. 而反对称张量 $f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1 \\ \hline i_2 \\ \hline\end{array}}=-f_{\begin{array}{|c|}\hline i_2 \\ \hline i_1 \\ \hline\end{array}}$. 因而在 Weyl 盘上填充数字 i 必须从上到下是递增的，即 $i_1<i_2$. 因而对称张量的维数为 $i=1, 2, \cdots, n$，在 Weyl 盘上 $\boxed{i_1}\boxed{i_2}$ 上填充得到允许的 Weyl 盘的数目，其中 $i_1=i_2$ 的盘的数目为 n 个，$i_1<i_2$ 的盘的数目为 $\frac{n(n-1)}{2}$ 个，总数为 $\frac{n(n+1)}{2}$ 个. 反对称张量的数目为 Weyl 盘 $\begin{array}{|c|}\hline i_1 \\ \hline i_2 \\ \hline\end{array}$ 按 $i_1<i_2$ 填充得到的盘数，它们为 $\frac{n(n-1)}{2}$.

对二秩张量的这种处理，虽然简单但具有一般性. 下面讨论 m 秩张量的一般不可约约问题.

3. m 秩张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 的不可约约化

m 秩张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 荷载了 $U(n)$ 群的直积表示 $\underbrace{[1]\otimes[1]\otimes\cdots\otimes[1]}_{m}$ 或 $\underbrace{\square\otimes\square\otimes\cdots\otimes\square}_{m}$. 其中每个张量分量有 m 个脚标，即 $f_{i_1i_2\cdots i_m}$. 对这些脚标定义一个置换群 S_m.

在第七章中已讨论过，置换群 S_m 的不可约表示由分割 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m]$ $\left(\sum_{i=1}^{m}\lambda_i=m\right)$ 或 Young 图标记，一定 Young 图可得到与它所代表的不可约表示维数相同

的标准 Young 盘. 每个标准 Young 盘由 Young 图上每个方块按特定顺序填充上 1, 2, …, m 而构成. 对于每个标准 Young 盘都可定义一个 Young 算子, 在(7. 8. 3)式中已给出了对于分割$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m]$的第 i 个标准 Young 盘的 Young 算子为

$$\hat{Y}_i^{[\lambda]} = \hat{A}_i^{[\lambda]}\hat{S}]_i^{[\lambda]} = \sum_j \sum_{P_j} (-1)^{P_j} P_j \sum_k \sum_{P_k} P_k$$

其中 $\hat{A}_i^{[\lambda]}$ 为标准 Young 盘每一个列上的全部置换$(-1)^{P_j}P_j$ 之总和, $\hat{S}]_i^{[\lambda]}$ 为该 Young 盘每一行上全部置换 P_k 之总和.

Young 算子可由 S_m 群表示空间中投影出 S_m 群的不变子空间, 构成具有 Young 图所标记的置换对称性的不可约表示空间.

现在把 Young 算子作用于 m 秩张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 也可投影出不可约张量子空间, 而且这个子空间是 $U(n)$群的不变子空间. 下面就证明这一点.

令 $\hat{Y}_i^{[\lambda]}$ 作用于张量空间 $V_n^{\otimes m}$, 即

$$\hat{Y}_i^{[\lambda]} V_n^{\otimes m} = F^{(m)}([\lambda], i) \tag{12.1.5}$$

其中 $F^{(m)}([\lambda], i)$表示由 Young 图$[\lambda]$的第 i 个标准 Young 盘的 Young 算子从张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 投影出的子空间.

由于 $U(n)$群的算子 $\hat{P}(u)$ 与 S_m 群的所有置换都交换, 因而用 $\hat{P}(u)$ 作用子空间 $F^{(m)}([\lambda], i)$, 得到

$$\begin{aligned} \hat{P}(u)F^{(m)}([\lambda], i) &= \hat{P}(u)\hat{Y}_i^{[\lambda]} V_n^{\otimes m} \\ &= \hat{Y}_i^{[\lambda]}[\hat{P}(u)V_n^{\otimes m}] \subseteq \hat{Y}_i^{[\lambda]} V_n^{\otimes m} \\ &= F^{[m]}([\lambda], i) \end{aligned} \tag{12.1.6}$$

在得到上式时, 利用了

$$\hat{P}(u)V_n^{\otimes m} \subseteq V_n^{\otimes m}$$

这就证明了具有特定置换对称性的张量空间 $F^{[m]}([\lambda], i)$是 $U(n)$群的不变空间, 称 $F^{[m]}([\lambda], i)$为以$[\lambda]$, i 标记的不可约张量空间.

$[\lambda]$, i 实际上是$[\lambda]$的第 i 个标准 Young 盘.

按它的顺序把数字 k 换为 i_k, 得到的盘称为 Weyl 盘, 这个 Weyl 盘为由它代表 Young 算子 $\hat{Y}_i^{[\lambda]}$ 从张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 中投影出来的不可约张量空间 $F^{[m]}([\lambda], i)$.

由于 Weyl 盘所描述的不可约张量, 每行上脚标置换具有对称性, 因而每一行从右至左填充的 i_1, i_2…必须满足条件 $i_1 \leqslant i_2 \leqslant i_3 \leqslant \cdots$. 每列上 i_1, i_2 置换具有反对称性, 因而每一列从上到下填充的 i_1, i_2…必须 $i_1 < i_2 < \cdots$.

对于一定以 i_1, $i_2 \cdots i_m$ 填充的 Weyl 盘, 把 i_1, $i_2 \cdots i_m$ 取 1, 2, …, n 按上述规则进行填充, 能够得到多少种具体的 Weyl 盘就表示这个 Young 盘所描述的不可约张量是多少维的.

在上面的讨论中, 虽然证明了不可约张量空间 $F^{[m]}([\lambda], i)$, 或用 Weyl 盘代表的不可约张量空间 $F^{[m]}\left(\quad\right)$, 对 $U(n)$群是不变空间, 但并未证明其中是否存在更

小的不变子空间，但是可以证明其中不再包括更小的不变子空间了，因而它是 $U(n)$ 群的不可约表示空间，这一点可参考 Hemermesh 的著作.

由上述讨论可看到张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 荷载了 $U(n)$ 群和 S_m 群的可约表示，对 $U(n)$ 群这种可约表示为直积表示

$$[1]\otimes[1]\otimes\cdots\otimes[1] \quad 或 \quad \square\otimes\square\otimes\cdots\otimes\square \quad （维数为 n^m）$$

对 S_m 群的 $S_1^{(1)}$，$S_1^{(2)}\cdots S_1^{(m)}$（它们分别代表对脚标 1，2，…，$m$ 的置换 S_1）的外积表示.

$$[1]\odot[1]\odot\cdots\odot[1] \quad 或 \quad \square\odot\square\odot\cdots\odot\square \quad （维数为 n^m）$$

因而可分解为各自不可约表示的直和. 以 $S^{[\lambda]}$ 表示这种分解中 S_m 群的不可约表示，以 $U^{[\lambda]}$ 代表 $U(n)$ 群的不可约表示，$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m]$，$\sum\limits_i \lambda_i = m$ 分解结果为

$$\begin{cases}[1]\otimes[1]\otimes\cdots\otimes[1] = \sum\limits_{[\lambda]}\oplus a_\lambda U^{[\lambda]} \\ [1]\odot[1]\odot\cdots\odot[1] = \sum\limits_{[\lambda]}\oplus b_\lambda S^{[\lambda]}\end{cases} \tag{12.1.7}$$

对 $[\lambda]$ 的求和取遍所有可能的 Young 图，而 $U(n)$ 群不可约表示 $U^{[\lambda]}$ 出现的重复度 a_λ 等于置换群 S_m 不可约表示 $S^{[\lambda]}$ 的维数，即

$$a_\lambda = D_{[\lambda]}(S_m) \tag{12.1.8}$$

S_m 群不可约表示分解中 $S^{[\lambda]}$ 出现的重复度 $b_{[\lambda]}$ 等于 $U(n)$ 群不可约表示 $U^{[\lambda]}$ 的维数. 即

$$b_{[\lambda]} = D_{[\lambda]}(U(n)) \tag{12.1.9}$$

这一结论（即(12.1.7)，(12.1.8)，(12.1.9)）作为一个定理的证明可参阅 Boerner. H 等"Representations of Groups".

下面以三秩张量空间 $V_n^{\otimes 3}$ 的不可约张量分解为例，进行具体说明.

张量空间 $V_n^{\otimes 3}$ 荷载了 $U(n)$ 群的直积表示 $[1]\otimes[1]\otimes[1]$. 从脚标置换群 S_3 来看，可认为是置换群 $S_1(1)$，$S_1(2)$，$S_1(3)$ 不可约表示□的基矢的外积.

$$\square\odot\square\odot\square$$

构成 S_3 群的表示空间，按第七章外积分解规则，外积表示对 S_3 群不可约表示分解为

$$\square\odot\square\odot\square = \square\square\square \oplus \begin{array}{c}\square\\ \square\\ \square\end{array} \oplus 2\ \begin{array}{cc}\square&\square\\ \square&\end{array}$$

因而张量空间 $V_n^{\otimes 3}$ 可分解为上述三种不可约张量空间的直和. 这三种对称类型的不可约张量空间可由三种 Young 算子而得到.

1° 对称表示 □□□ 的不可约张量空间

□□□ 只有一个标准 Young 盘 $\boxed{1}\boxed{2}\boxed{3}$，因而 Young 算子为

$$\hat{Y}^{[3]} = E + (1,2) + (1,3) + (2,3) + (1,2,3) + (1,3,2)$$

于是全对称的不可约张量为

$$f_{\boxed{i_1}\boxed{i_2}\boxed{i_3}} = \hat{Y}^{[3]} f_{i_1i_2i_3} = f_{i_1i_2i_3} + f_{i_2i_1i_3} + f_{i_3i_2i_1} + f_{i_1i_3i_2} + f_{i_2i_3i_1} + f_{i_3i_1i_2}$$

由于脚标置换的对称性，显然 $f_{\boxed{i_2}\boxed{i_1}\boxed{i_3}} = f_{\boxed{i_1}\boxed{i_2}\boxed{i_3}}$，因而独立的张量必然是 $i_1 \leqslant i_2 \leqslant i_3$. 比如对三维空间 V_3，全对称张量是 10 维的，即

$$\boxed{1|1|1},\ \boxed{2|2|2},\ \boxed{3|3|3},\ \boxed{1|1|2},\ \boxed{1|1|3}$$

$$\boxed{1|2|2},\ \boxed{1|2|3},\ \boxed{1|3|3},\ \boxed{2|2|3},\ \boxed{2|3|3}$$

这 10 维的全对称型不可约张量空间荷载了 $U(3)$ 群的不可约表示，即

$$\hat{P}(u)f_{\boxed{i_1|i_2|i_3}} = \sum_{i_1'i_2'i_3} u_{i_1'i_1}u_{i_2'i_2}u_{i_3'i_3}f_{\boxed{i_1'|i_2'|i_3'}}$$

这 10 维表示的表示矩阵由酉矩阵 u 的矩阵元的三次整函数构成. 但一定要注意它们已不是由 u 的直积 $u\otimes u\otimes u$ 构成的 27×27 的矩阵元了. 由于对称张量限制了在求和中 $i_1' \leqslant i_2' \leqslant i_3'$，因而是 10×10 的矩阵.

2° 反对称张量空间

反对称 Young 算子为

$$Y^{[1^3]} = E-(1,2)-(1,3)-(2,3)+(1,2,3)+(1,3,2)$$

因而反对称张量为

$$f_{\begin{smallmatrix}\boxed{i_1}\\\boxed{i_2}\\\boxed{i_3}\end{smallmatrix}} = Y^{[1^3]}f_{i_1i_2i_3} = f_{i_1i_2i_3} - f_{i_2i_1i_3} - f_{i_1i_3i_2} - f_{i_3i_2i_1} + f_{i_2i_3i_1} + f_{i_3i_1i_2}$$

显然

$$f_{\begin{smallmatrix}\boxed{i_1}\\\boxed{i_2}\\\boxed{i_3}\end{smallmatrix}} = -f_{\begin{smallmatrix}\boxed{i_2}\\\boxed{i_1}\\\boxed{i_3}\end{smallmatrix}} = f_{\begin{smallmatrix}\boxed{i_3}\\\boxed{i_1}\\\boxed{i_2}\end{smallmatrix}}$$

因而独立反对称张量必须 $i_1<i_2<i_3$. 它们构成 $U(n)$ 群的不可约表示，即

$$\hat{P}(u)f_{\begin{smallmatrix}\boxed{i_1}\\\boxed{i_2}\\\boxed{i_3}\end{smallmatrix}} = \sum_{i_1'i_2'i_3'} u_{i_1'i_1}u_{i_2'i_2}u_{i_3'i_3}f_{\begin{smallmatrix}\boxed{i_1'}\\\boxed{i_2'}\\\boxed{i_3'}\end{smallmatrix}}$$

当 $n=3$ 时，反对称张量是一维的，即 $f_{\begin{smallmatrix}\boxed{1}\\\boxed{2}\\\boxed{3}\end{smallmatrix}}$，而且

$$\hat{P}(u)f_{\begin{smallmatrix}\boxed{1}\\\boxed{2}\\\boxed{3}\end{smallmatrix}} = \sum_{i_1'i_2'i_3'} u_{i_1'1}u_{i_2'2}u_{i_3'3}f_{\begin{smallmatrix}\boxed{i_1'}\\\boxed{i_2'}\\\boxed{i_3'}\end{smallmatrix}} = u_{11}u_{22}u_{33}f_{\begin{smallmatrix}\boxed{1}\\\boxed{2}\\\boxed{3}\end{smallmatrix}}$$

3° 对称类型为 $\begin{smallmatrix}\boxed{\ }\boxed{\ }\\\boxed{\ }\ \ \ \end{smallmatrix}$ 的不可约张量空间

Young 图 $\begin{smallmatrix}\boxed{\ }\boxed{\ }\\\boxed{\ }\ \ \ \end{smallmatrix}$ 有两个标准 Young 盘：

$$\underset{1}{\begin{smallmatrix}\boxed{1}\boxed{2}\\\boxed{3}\ \ \ \end{smallmatrix}} \qquad \underset{2}{\begin{smallmatrix}\boxed{1}\boxed{3}\\\boxed{2}\ \ \ \end{smallmatrix}}$$

因而有两个 Young 算子：

$$\hat{Y}_1^{[21]} = [E-(1,3)][E+(1,2)], \quad \hat{Y}_2^{[21]} = [E-(1,2)][E+(1,3)]$$

由 $\hat{Y}_1^{[21]}$ 得到不可约张量

$$f_{\begin{smallmatrix}\boxed{i_1}\boxed{i_2}\\\boxed{i_3}\ \ \ \end{smallmatrix}} = \hat{Y}_1^{[21]}f_{i_1i_2i_3} = f_{i_1i_2i_3} + f_{i_2i_1i_3} - f_{i_3i_2i_1} - f_{i_2i_3i_1}$$

由 $\hat{Y}_2^{[21]}$ 得到

$$f_{\begin{smallmatrix} i_1 & i_3 \\ i_2 & \end{smallmatrix}} = \hat{Y}_2^{[21]} f_{i_1 i_3 i_2} = f_{i_1 i_3 i_2} + f_{i_3 i_1 i_2} - f_{i_2 i_3 i_1} - f_{i_3 i_2 i_1}$$

容易看到

$$f_{\begin{smallmatrix} i_3 & i_2 \\ i_1 & \end{smallmatrix}} = -f_{\begin{smallmatrix} i_1 & i_2 \\ i_3 & \end{smallmatrix}}$$

$$f_{\begin{smallmatrix} i_2 & i_1 \\ i_3 & \end{smallmatrix}} = f_{\begin{smallmatrix} i_1 & i_2 \\ i_3 & \end{smallmatrix}} - f_{\begin{smallmatrix} i_1 & i_3 \\ i_2 & \end{smallmatrix}}$$

这表明独立的不可约张量要求每一行上 i_1, i_2, i_3, …要满足条件 $i_1 \leqslant i_2 \leqslant i_3 \leqslant \cdots$, 每一列上从上到下要满足条件 $i_1 < i_2 < i_3 < \cdots$.

这两种类型的张量分别构成 $U(n)$ 群的不可约表示空间，即

$$\hat{P}(u) f_{\begin{smallmatrix} i_1 & i_2 \\ i_3 & \end{smallmatrix}} = \sum_{i_1' i_2' i_3'} u_{i_1' i_1} u_{i_2' i_2} u_{i_3' i_3} f_{\begin{smallmatrix} i_1' & i_2' \\ i_3' & \end{smallmatrix}}$$

$$\hat{P}(u) f_{\begin{smallmatrix} i_1 & i_3 \\ i_2 & \end{smallmatrix}} = \sum_{i_1' i_2' i_3'} u_{i_1' i_1} u_{i_2' i_2} u_{i_3' i_3} f_{\begin{smallmatrix} i_1' & i_3' \\ i_2' & \end{smallmatrix}}$$

这样就得到了直积分解中所包括的两种不可约表示 $\begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \end{smallmatrix}$.

还以 $n=3$ 为例，由 Weyl 盘 $\begin{smallmatrix} i_1 & i_2 \\ i_3 & \end{smallmatrix}$ 按 $i_1 \leqslant i_2$, $i_1 < i_3$ 的规则取 $i_1 i_2 i_3 = 1, 2, 3$, 可得到 8 种具体的 Weyl 盘：

$$\begin{smallmatrix} 1 & 1 \\ 2 & \end{smallmatrix} \quad \begin{smallmatrix} 1 & 1 \\ 3 & \end{smallmatrix} \quad \begin{smallmatrix} 1 & 2 \\ 2 & \end{smallmatrix} \quad \begin{smallmatrix} 1 & 3 \\ 2 & \end{smallmatrix} \quad \begin{smallmatrix} 1 & 3 \\ 3 & \end{smallmatrix} \quad \begin{smallmatrix} 2 & 2 \\ 3 & \end{smallmatrix} \quad \begin{smallmatrix} 1 & 2 \\ 3 & \end{smallmatrix} \quad \begin{smallmatrix} 2 & 3 \\ 3 & \end{smallmatrix}$$

因而这种不可约表示是 8 维的.

由上面讨论就得到 $U(n)$ 群直积表示的不可约分解，即

$$\square \otimes \square \otimes \square = \square\square\square \oplus \begin{smallmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{smallmatrix} \oplus 2 \begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \end{smallmatrix}$$

12.1.3　$U(n)$ 群不可约表示的完备性、Young 图与不可约表示的维数

1. $U(n)$ 群不可约表示的完备性

由上述讨论可看到，通过 Young 算子构造了 $U(n)$ 群的不可约表示. 这种表示的表示矩阵由酉矩阵 u 的矩阵元的 m 次整函数构成，称为 $U(n)$ 群的 m 级不可约表示. 下面定理给出由张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 得到的 m 级不可约表示是完备的，也就是说 $U(n)$ 群不再存在其它 m 级表示.

定理 12.1.2　$U(n)$ 群的每个 m 级不可约表示，都包括在直积空间 $V_n^{\otimes m}$ 之中.

这个定理的证明，可参考 Boerner H 著"Representations of Groups".

这个定理保证了由 $V_n^{\otimes m}$ 分解得到了 $U(n)$ 群的全部 m 级不可约表示.

2. $U(n)$群的 Young 图

置换群 S_m 的 Young 图对应于分割 $[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m]\sum_{i=1}^{m}\lambda_i=m$. 现在定义 $U(n)$群的 Young 图，它对应于分割 $[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]\sum_{i=1}^{n}\lambda_i=m$, $m=1, 2, 3, \cdots$. 当 $m\leqslant n$ 时，这两种 Young 图没有差别. 而当 $m>n$ 时，$U(n)$的 Young 图仅限于$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$. 因为置换群的 Young 图$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n, \lambda_{n+1}, \cdots\lambda_m]$. 当 $\lambda_{n+1}\neq 0$ 时，相应 Weyl 盘上，第一列包括 $i_1, i_2, \cdots, i_n, i_{n+1}, \cdots$. 而这些 i_k 取 $1, 2, \cdots, n$，多于 n 个的 i_k，必然出现 $1, 2, 3, \cdots, n$ 中数字的重复. 由于不可约张量列置换的反对称性，这种张量必然为零. 因而对于非零的不可约张量，只能由 $U(n)$群的 Young 图$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$来描述.

3. $U(n)$群不可约表示$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$的维数

以 Young 图$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$标记的 $U(n)$群的不可约表示的维数，等于相应 Weyl 盘用 $i=1, 2, \cdots, n$ 按规则填充出的具体 Weyl 盘的数目. 它们也可给出解析表达式，下面分别几种情况进行讨论.

1° 全对称不可约表示$[\lambda]=[k, 0, \cdots, 0]$的维数

这种不可约表示的 Weyl 盘为

$$\boxed{i_1}\boxed{i_2}\boxed{\cdots}\boxed{i_k}\,,\quad i_1\leqslant i_2\leqslant\cdots\leqslant i_k,\ i_1, i_2, \cdots, i_k=1, 2, \cdots, n$$

这个条件也可写为

$$0\leqslant i_1<i_2+1<i_3+2<i_4+3<\cdots<i_k+k-1\leqslant n+k-1$$

因而这种 Weyl 盘的数目相当于在 $n+k-1$ 个数字数中任取 k 个的可能取值的数目，因而不可约表示$[k]$的维数

$$D_{[k]}=\binom{n+k-1}{k}=\frac{(n+k-1)!}{k!\ (n-1)!}\tag{12.1.10}$$

2° 全反对称不可约表示$[1^k]=[1, 1, 1, \cdots, 0, 0, 0, \cdots, 0]$的维数

此时 Weyl 盘为

$$\begin{array}{|c|}\hline i_1\\\hline i_2\\\hline \vdots\\\hline i_k\\\hline\end{array}$$

按 $i_1<i_2<\cdots<i_k$ 对 $i_1, i_2, \cdots, i_k$ 填充 $1, 2, \cdots, n$ 的可能填充的数目数为$\binom{n}{k}$, $(k\leqslant n)$, 因而不可约表示$[1^k]$的维数为

$$D_{[1^k]}=\binom{n}{k}=\frac{n!}{k!\ (n-k)!}\tag{12.1.11}$$

3° $[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$标记的不可约表示的维数

下面不加证明地给出 $U(n)$群不可约表示$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$的维数 $D_{[\lambda]}$.

$$
\begin{aligned}
D_{[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]} &= \frac{1}{1!2!3!\cdots(n-1)!}\prod_{i=1}^{n-1}(\lambda_i-\lambda_{i+1}+1) \\
&\quad (\lambda_i-\lambda_{i+2}+2)\cdots(\lambda_i-\lambda_n+n-i) \\
&= \frac{1}{1!2!3!\cdots(n-1)!}\prod_{n<j}(\lambda_i-\lambda_j-i+j) \\
&= \frac{1}{1!2!3!\cdots(n-1)!}\prod_{n<j}(h_i-h_j) \qquad (12.1.12)
\end{aligned}
$$

其中 $h_i=\lambda_i+n-i$. 这个公式与(10.3.15)和(10.3.15′)式给出的 Lie 代数 A_{n-1} 的维数是一致的.

这个公式可由 $U(n)$ 群不可约表示 $[\lambda]$ 对单位元的特征标得到.

4° 两类有用的不可约表示的维数

由(12.1.12)式可得到两类常用的不可约表示的维数，即

$$
D_{[k,1]}=n\binom{n+k-1}{k}-\binom{n+k}{k+1}
$$

不可约表示 $\begin{smallmatrix}\square&\square&\square\\\square&&\end{smallmatrix}$ 对描述自旋的 $U(2)$ 群是很有用的.

另一个是

$$
D_{[2,1^{n-2}]}=n^2-1
$$

它对研究电子轨道空间 $U(n)$ 群的表示也是很有用的.

12.1.4　$SU(n)$ 群的不可约表示

$SU(n)$ 群是 $U(n)$ 群的子群，它由单模酉矩阵构成，即

$$
SU(n)=\{u\mid u\in U(n),\ \det u=1\}
$$

可以证明 $U(n)$ 群的不可约表示对于子群 $SU(n)$ 仍然是不可约的(这一点的证明可参阅 Hamermesh 的著作). 但是 Weyl 证明了 $U(n)$ 群的两个不可约表示 $[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$ 与 $[\lambda']=[\lambda_1+s,\lambda_2+s,\cdots,\lambda_n+s]$ (s 为任意整数) 对 $SU(n)$ 群是等价的表示(见 Weyl 著"The Classical Group"). 这一点也可由下面的简单分析看到.

对反对称张量 $f_{\begin{smallmatrix}1\\2\\\vdots\\n\end{smallmatrix}}$，可得到

$$
\begin{aligned}
\hat{P}(u)\,f_{\begin{smallmatrix}1\\2\\\vdots\\n\end{smallmatrix}} &= \sum_{i_1,i_2,\cdots,i_n} u_{i_1'1}u_{i_2'2}\cdots u_{i_n'n}\,f_{\begin{smallmatrix}i_1'\\i_2'\\\vdots\\i_n'\end{smallmatrix}} \\
&= \sum_{i_1',i_2',\cdots,i_n'}(-1)^{i_1,i_2,\cdots,i_n'}u_{i_1'1}u_{i_2'2}\cdots u_{i_n'n}\,f_{\begin{smallmatrix}1\\2\\\vdots\\n\end{smallmatrix}} \\
&= \det u\, f_{\begin{smallmatrix}1\\2\\\vdots\\n\end{smallmatrix}}
\end{aligned}
$$

其中$(-1)^{[i_1', i_2', \cdots, i_n']}$，为把反对称张量$f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1'\\ \hline i_2'\\ \hline \vdots\\ \hline i_n'\\ \hline\end{array}}$变为$f_{\begin{array}{|c|}\hline 1\\ \hline 2\\ \hline \vdots\\ \hline n\\ \hline\end{array}}$产生的相因子，而上式中求和正是$u$的行列式.

(12.1.11)式表明，对于$U(n)$群一维张量$f_{\begin{array}{|c|}\hline 1\\ \hline 2\\ \hline \vdots\\ \hline n\\ \hline\end{array}}$在$U(n)$群作用下变为$\det u\, f_{\begin{array}{|c|}\hline 1\\ \hline 2\\ \hline \vdots\\ \hline n\\ \hline\end{array}}$，并不是恒等表示的基矢. 但是对于$SU(n)$群，因为$\det u=1$，$f_{\begin{array}{|c|}\hline 1\\ \hline 2\\ \hline \vdots\\ \hline n\\ \hline\end{array}}$才是$SU(n)$群一维恒等表示的基矢.

同样，对于不可约表示$[k^n]=[k, k, \cdots, k]$，张量$f_{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&\cdots&1\\ \hline 2&\cdots&2\\ \hline \vdots&&\vdots\\ \hline n&\cdots&n\\ \hline\end{array}}$在$\hat{P}(u)$作用下为

$$\hat{P}(u)f_{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&\cdots&1\\ \hline 2&\cdots&2\\ \hline \vdots&&\vdots\\ \hline n&\cdots&n\\ \hline\end{array}}=[\det u]^k f_{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&\cdots&1\\ \hline 2&\cdots&2\\ \hline \vdots&&\vdots\\ \hline n&\cdots&n\\ \hline\end{array}} \tag{12.1.13}$$

而对$SU(n)$群由于$[\det u]^k=1$，$[k^n]$张量才给出一维恒等表示.

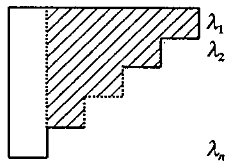
由这种分析可得到$U(n)$群的不可约表示$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$和$[\lambda_1+s, \lambda_2+s, \cdots, \lambda_n+s]$，表示矩阵之间差因子$[\det u]^s$，虽然表示维数相同，却是两个不同的表示，然而对$SU(n)$群，因子$[\det u]^s=1$，因而是同一个不可约表示. 这就证明了 Weyl 的结论，即

$$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n] \backsimeq [\lambda_1+s, \lambda_2+s, \cdots, \lambda_n+s] \tag{12.1.14}$$

如果取$s=-\lambda_n$，则

$$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n] \backsimeq [\lambda_1-\lambda_n, \lambda_2-\lambda_n, \cdots, \lambda_{n-1}-\lambda_n, 0] \tag{12.1.15}$$

这种等价关系可用 Young 图表示为右图，其中阴影部分为等式右边的 Young 图.



因而一般$SU(n)$群的不可约表示都用$(n-1)$行的 Young 图标记，即$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{n-1}]$.

此外还可证明，对于$SU(n)$群，不可约表示$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$与不可约表示$[\lambda']=[\lambda_1-\lambda_n, \lambda_1-\lambda_{n-1}, \cdots, \lambda_1-\lambda_2]$是等价的，即

$$[\lambda_1-\lambda_n, \lambda_1-\lambda_{n-1}, \cdots, \lambda_1-\lambda_2] \backsimeq [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n] \tag{12.1.16}$$

这两种等价关系可用 Young 图表示，如右图. 也就是 Young 图$[\lambda]$与虚线表示的另一 Young 图$[\lambda']$给出的是等价表示.

由这一结果可得到不可约表示$[1^{n-1}]$与$[1]$等价，不可约表示$[1^{n-r}]$与$[1^r]$等价.

12.1.5 $U(n)$群和$SO(n)$群的特征标与不可约表示直积的分解

1. $U(n)$群和$SU(n)$群的特征标

1° $U(n)$群和$SU(n)$群的共轭类

对于$U(n)$群的元素酉矩阵u，可由$n\times n$的酉矩阵V对角化，即

$$VuV^{+}=\begin{pmatrix}\varepsilon_1 & & & 0\\ & \varepsilon_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \varepsilon_n\end{pmatrix}$$

对角元 ε_i 具有性质 $|\varepsilon_i|^2=1$，因而可用 n 个绝对值为 1 的复数 $[\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n]$ 描述 $U(n)$ 群的共轭类. 对于 $SU(n)$ 群，同样由 n 个绝对值为 1 的复数 $[\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n]$ 来描述共轭类，只是增加 1 个条件

$$\sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i=1$$

2° 以 $[\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n]$ 标记的共轭类的特征标

Weyl 证明了 $U(n)$ 群以 $[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ 标记的不可约表示对于以 $[\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n]$ 标记的类的特征标 $\chi^{[\lambda]}(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)$ 为

$$\chi^{[\lambda]}(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)=\frac{|\varepsilon^{h_1}\varepsilon^{h_2}\cdots\varepsilon^{h_n}|}{|\varepsilon^{n-1}\varepsilon^{n-2}\cdots 1|} \tag{12.1.17}$$

其中

$$\begin{cases}|\varepsilon^{h_1}\varepsilon^{h_2}\cdots\varepsilon^{h_n}|=\det\begin{pmatrix}\varepsilon_1^{l_1} & \varepsilon_1^{l_2} & \cdots & \varepsilon_1^{l_n}\\ \varepsilon_2^{l_1} & \varepsilon_2^{l_2} & \cdots & \varepsilon_2^{l_n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \varepsilon_n^{l_1} & \varepsilon_n^{l_2} & \cdots & \varepsilon_n^{l_n}\end{pmatrix}\\ |\varepsilon^{n-1}\varepsilon^{n-2}\cdots 1|=\det\begin{pmatrix}\varepsilon_1^{n-1} & \varepsilon_1^{n-2} & \cdots & \varepsilon_1^{0}\\ \varepsilon_2^{n-1} & \varepsilon_2^{n-2} & \cdots & \varepsilon_2^{0}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \varepsilon_n^{n-1} & \varepsilon_n^{n-2} & \cdots & \varepsilon_n^{0}\end{pmatrix}\end{cases} \quad l_i=\lambda_i+n-i,\quad i=1,2,\cdots,n \tag{12.1.18}$$

这个公式的证明可参阅 Weyl 著“The Classical Groups”或参阅密勒著栾德怀等译《对称性群及其应用》.

通常特征标 $\chi^{[\lambda]}(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)$ 表示为

$$\chi^{[\lambda]}(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)=\{\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n\}$$

并称为 Schur 函数.

由(12.1.12)式可得到

$$\{\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n\}=(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)^{-s}\{\lambda_1+s, \lambda_2+s, \cdots, \lambda_n+s\}$$

对于 $SU(n)$ 群 $(\varepsilon_1\varepsilon_2\cdots\varepsilon_n)=1$，因而对于 $SU(n)$ 群不可约 $[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ 与 $[\lambda']=[\lambda_1+s, \lambda_2+s, \cdots, \lambda_n+s]$ 具有相同的特征标，因而它们是等价的. 这也是对(12.1.14)式的严格证明.

由特征标公式(12.1.17)，对 $U(n)$ 群的单位元可得到不可约表示 $[\lambda]$ 的维数.

对于单位元素 e，$\varepsilon_1=\varepsilon_2=\cdots=\varepsilon_n=1$. 但是如直接取 $\varepsilon_i=1$，则(12.1.11)式为不定

式，因而对(12.1.17)式求极限，有

$$\begin{aligned}\chi^{[\lambda]}(e) &= \lim_{\varepsilon\to1}\frac{|\varepsilon^{h_1}\varepsilon^{h_2}\cdots\varepsilon^{h_n}|}{|\varepsilon^{n-1}\varepsilon^{n-2}\cdots1|}\\ &= \lim_{\varepsilon\to1}\{[\prod_{j<k}(\varepsilon^{h_j}-\varepsilon^{h_k})]/[\prod_{j<k}(\varepsilon^{n-j}-\varepsilon^{n-k})]\}\\ &= \lim_{\varepsilon\to1}\{[\prod_{j<k}(e^{i\varphi h_j}-e^{i\varphi h_k})]/[\prod_{j<k}(e^{i\varphi(h-j)}-e^{i\varphi(n-k)})]\}\\ &= \lim_{\varepsilon\to1}\{\prod_{j<k}i(h_j-h_k)\varphi/\prod_{j<k}i(k-j)\varphi\}\\ &= \prod_{j<k}(h_i-h_j)/\prod_{j<k}(k-j)\end{aligned}$$

此即 $U(n)$ 群不可约表示 $[\lambda]$ 的维数公式(12.1.12).

在上式取极限过程利用了 $\varepsilon^{h_i}=e^{i\varphi h_i}\approx1+i\varphi h_i$，因而

$$\varepsilon^{h_i}-\varepsilon^{h_j}=i(h_i-h_j)\varphi,\ \varepsilon^{n-j}-\varepsilon^{n-k}=[(n-j)-(n-k)]i\varphi=(k-j)i\varphi$$

2. *$U(n)$ 群直积表示的分解*

$U(n)$ 群不可约表示 $[\lambda]$ 和 $[\mu]$ 的直积给出直积表示 $[\lambda]\otimes[\mu]$. 把这种直积表示分解为不可约表示的直和，即

$$[\lambda]\otimes[\mu]=\sum_{[\nu]}\oplus a^{\nu}_{\lambda\mu}[\nu] \tag{12.1.19}$$

这是一个重要问题，其中 $a^{\nu}_{\lambda\mu}$ 为不可约表示 $[\nu]$ 的重复度.

直积表示 $[\lambda]\otimes[\mu]$ 的特征标为

$$\chi^{[\lambda]\otimes[\mu]}(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_n)=\chi^{[\nu]}(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_n)\chi^{[\mu]}(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_n)$$

也可写为 Schur 函数 $\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}$ 与 $\{\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_n\}$ 乘积的分解问题，即

$$\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}\{\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_n\}=\sum_{\nu}\oplus\{\nu_1,\nu_2,\cdots,\nu_n\} \tag{12.1.20}$$

其中 Schur 函数 $\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}$ 代表不可约表示 $[\nu]=[\nu_1,\nu_2,\cdots,\nu_n]$ 的特征标. 按 Schur 函数理论可解决(12.1.20)式的分解问题. 但通常这种分解可用 Young 图来表示. 下面不加证明地说明这种直积分解规则.

(12.1.20)式中出现的 Schur 函数 $\{\nu_1,\nu_2,\cdots,\nu_n\}$ 可用 $\{\lambda\}$ 和 $\{\mu\}$ 来构造.

对于不可约表示 $[\mu]$，用 μ_i 个 α_i 标记它的 Young 图第 i 行上的方块. 把这些方块按如下规则全部填加到不可约表示 $[\lambda]$ 的 Young 图上，得到新的 Young 图，即为(12.1.20)式中出现的 Schur 函数 $\{\nu\}$ 所对应的 Young 图. 这些规则是：

(1) 在把 Young 图 $[\mu]$ 上的方块加到 Young 图 $[\lambda]$ 上时，每一填加步骤都要构成允许的 Young 图.

(2) 在填加过程中具有相同标记 α_i 的方块不能出现在同一列中.

(3) 对于扩大后的 Young 图，从第 1 行开始，从右到左数填入的符号 $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n$ 的数目要求 α_i 的数目不应小于 α_{i+1} 的数目.

在满足上述条件下，所有可能填充方法得到的包括 $\sum_{i=1}^{n}(\lambda_i+\mu_i)$ 个方块的全部新的扩大了的 Young 图，就给出了(12.1.20)式中的全部 Schur 函数，即得到了直积表示中所

包括的全部不可约表示.

下面给出两个直积分解的简例.

例 1　不可约表示直积$[1^3]\otimes[21]$的分解.

不可约表示$[1^3]$的 Young 图为 ，$[21]$的 Young 图为 ，在它上面用 α_1 和 α_2 标出两行上的方块，按上面的规则，可得到

如 Young 图 是不允许的，它必然出现 α_1，α_1 在 1 列上.

例 2　$[21]\otimes[21]$的分解.

对于 Schur 函数乘积的分解，在 Wybourne 的著作"Symmetry Priciples in Atomic Spectroscopy"中给出了详尽的数表，为 $U(n)$ 群直积分解提供了有用工具.

12.1.6　$U(n)$ 群不可约表示的标准化不可约张量基

1. 标准化不可约张量

在第七章 7.8.2 节中已指出 Young 算子 $\hat{Y}_i^{[\lambda]}$ 很容易构造，但是由它得到的 S_m 群的不可约表示基矢给出的不可约表示不是酉表示. 为了解决这一问题，引入了标准化 Young 算子.

$$\hat{Y}^{[\lambda]}_{(r)(r')} = \sqrt{\frac{d([\lambda])}{n!}}\sum_{P\in S_n}\langle[\lambda](r')\mid\hat{P}\mid[\lambda](r)\rangle\hat{P} \qquad (7.8.6)$$

由它构造出的 S_m 群的不可约表示为酉表示，其中(r)，(r')为标记标准 Young 盘的 Yamanouchi符号，简称 Y-符号.

因此以 $\hat{Y}^{[\lambda]}_{(r)(r')}$ 代替 $\hat{Y}_i^{[\lambda]}$ 可得到标准的不可约张量. 这些不可约张量对 $U(n)$ 群和 S_m 群都可给出酉表示.

利用 Y-符号(r)与标准 Young 盘的字典顺序编号 i 的关系，也可用字典顺序 i 代替

Y-符号(r).

由标准 Young 算子 $\hat{Y}^{[\lambda]}_{(r)(r')}$得到的不可约张量为

$$\hat{Y}^{[\lambda]}_{(r)(r)} F^{(m)}_{i_1 i_2 \cdots i_m} = F^{(m)}([\lambda], \omega_i, (r)_j) \tag{12.1.21}$$

其中 Y-符号$(r)_j$ 表示 S_m 群不可约表示$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m]$的标准 Young 盘的序号，这种标准 Young 盘数目为 S_m 群不可约表示$[\lambda]$的维数，记为 $d([\lambda])$. ω 代表与标准 Young 盘(r)相对应的 Weyl 盘.

这种 Weyl 盘当按规则把 $i_1, i_2, \cdots, i_m$ 填充 $1, 2, \cdots, n$ 的数字后得到 $U(n)$不可约表示$[\lambda]$维数 $D([\lambda])$个具体 Weyl 盘，因而 ω_i 表示第 i 个 Weyl 盘，$i=1, 2, \cdots, D([\lambda])$.

因而(12.1.21)式表示的不可约张量可写为

$$|[\lambda], \omega_i, (r)_j\rangle, \quad i=1, 2, \cdots, D([\lambda]), \quad j=1, 2, \cdots, d([\lambda]) \tag{12.1.21'}$$

$d([\lambda])$为 S_m 群不可约表示$[\lambda]$的维数. 每一组基矢$\{|[\lambda], \omega_i, (r)_j\rangle, j=1, 2, \cdots, d([\lambda])\}$构成 S_m 群不可约表示$[\lambda]$的标准基矢，表示矩阵为酉矩阵. 每一组基矢$\{|[\lambda], \omega_i, (r)_j\rangle, \quad i=1, 2, \cdots, D([\lambda])\}$构成 $U(n)$群的不可约表示$[\lambda]$的基矢，它们给出的表示矩阵也是酉矩阵.

这些基矢$|[\lambda];\omega_{i,j}\rangle$可排列为

$$\begin{array}{cccc}
|[\lambda], \omega_1, (r)_1\rangle, & |[\lambda], \omega_1, (r)_2\rangle, & \cdots, & |[\lambda], \omega_1, (r)_d\rangle \\
|[\lambda], \omega_2, (r)_1\rangle, & |[\lambda], \omega_2, (r)_2\rangle, & \cdots, & |[\lambda], \omega_2, (r)_d\rangle \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
|[\lambda], \omega_D, (r)_1\rangle, & |[\lambda], \omega_D, (r)_2\rangle, & \cdots, & |[\lambda], \omega_D, (r)_d\rangle
\end{array}$$

每一列构成 $U(n)$群不可约表示$[\lambda]$的一组基，因而张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 中具有对称类典型$[\lambda]$的不可约张量子空间维数为 $D([\lambda])d([\lambda])$，包括了 $d([\lambda])$个不可约表示$[\lambda]$. 从另一方面看，每一行构成 S_m 群不可约表示的基矢，在这个张量子空间中有 $D([\lambda])$个 S_m 群的不可约表示$[\lambda]$，这与(12.1.7)式是完全一致的.

2. S_3 群的标准 Young 算子

S_3 群的标准 Young 盘为

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline\end{array} \qquad \begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} \qquad \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$$

(1)　　(111)　　(112)　　(123)

　　　　1　　　　1　　　　2

Young 盘下面(r)为 Y-编号，(r)下面数字为 Young 盘的字典顺序.

对这些标准 Young 盘，按(7.8.6)式得到的标准 Young 算子为

$$Y^{[3]}_{1,1} = \frac{1}{6}[E + (1,2) + (2,3) + (1,3) + (1,2,3) + (1,3,2)]$$

$$Y^{[1^3]}_{1,1} = \frac{1}{6}[E + (1,2,3) + (1,3,2) - (1,2) - (1,3) - (2,3)]$$

$$Y^{[21]}_{1,1}=\frac{1}{6}[2E+2(1,2)-(1,3)-(2,3)-(1,2,3)-(1,3,2)]$$

$$Y^{[21]}_{2,2}=\frac{1}{6}[2E-(1,2,3)-(1,3,2)-2(1,2)+(2,3)+(1,3)]$$

为了符号简单，在上式中用字典顺序代替 Y-符号(r).

用这些标准 Young 算子可得到 $U(n)$ 群的标准不可约表示张量，即

$$f_{\boxed{i_1}\boxed{i_2}\boxed{i_3}}=Y^{[3]}_{1,1}f_{i_1i_2i_3}$$

$$=\frac{1}{6}\{f_{i_1i_2i_3}+f_{i_2i_3i_1}+f_{i_3i_1i_2}+f_{i_2i_1i_3}+f_{i_1i_3i_2}+f_{i_3i_2i_1}\}$$

$$f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1\\\hline i_2\\\hline i_3\\\hline\end{array}}=Y^{[1^3]}_{1,1}f_{i_1i_2i_3}$$

$$=\frac{1}{6}\{f_{i_1i_2i_3}+f_{i_2i_3i_1}+f_{i_3i_1i_2}-f_{i_2i_1i_3}-f_{i_1i_3i_2}-f_{i_3i_2i_1}\}$$

$$f_{\begin{array}{|c|c|}\hline i_1&i_2\\\hline i_3\\\cline{1-1}\end{array}}=Y^{[21]}_{1,1}f_{i_1i_2i_3}$$

$$=\frac{1}{6}\{2f_{i_1i_2i_3}-f_{i_2i_3i_1}-f_{i_3i_1i_2}+2f_{i_2i_1i_3}-f_{i_1i_3i_2}-f_{i_3i_2i_1}\}$$

$$f_{\begin{array}{|c|c|}\hline i_1&i_3\\\hline i_2\\\cline{1-1}\end{array}}=Y^{[21]}_{2,2}f_{i_1i_2i_3}$$

$$=\frac{1}{6}\{2f_{i_1i_2i_3}-f_{i_2i_3i_1}-f_{i_3i_1i_2}-2f_{i_2i_1i_3}+f_{i_1i_3i_2}+f_{i_3i_2i_1}\}$$

如果 $n=3$，得到的不可约张量为

$$f_{\boxed{1}\boxed{1}\boxed{1}}=F_{111},\qquad f_{\boxed{2}\boxed{2}\boxed{2}}=F_{222},\qquad f_{\boxed{3}\boxed{3}\boxed{3}}=F_{333}$$

$$f_{\boxed{1}\boxed{1}\boxed{2}}=\frac{1}{3}\{f_{112}+f_{121}+f_{211}\}$$

$$f_{\boxed{2}\boxed{1}\boxed{3}}=\frac{1}{3}\{f_{113}+f_{131}+f_{311}\}$$

$$f_{\boxed{1}\boxed{2}\boxed{2}}=\frac{1}{3}\{f_{122}+f_{221}+f_{212}\}$$

$$f_{\boxed{2}\boxed{2}\boxed{3}}=\frac{1}{3}\{f_{223}+f_{232}+f_{322}\}$$

$$f_{\boxed{1}\boxed{3}\boxed{3}}=\frac{1}{3}\{f_{133}+f_{331}+f_{313}\}$$

$$f_{\boxed{2}\boxed{3}\boxed{3}}=\frac{1}{3}\{f_{233}+f_{332}+f_{323}\}$$

$$f_{\boxed{1}\boxed{2}\boxed{3}}=\frac{1}{6}\{f_{123}+f_{231}+f_{312}+f_{213}+f_{132}+f_{321}\}$$

$$f_{\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 6\\\hline\end{array}}=\frac{1}{6}\{f_{123}-f_{231}-f_{321}-f_{123}+f_{231}+f_{312}\}$$

$$f_{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}}=\frac{1}{3}\{2f_{112}-f_{121}-f_{211}\}$$

$$f_{\begin{smallmatrix}1&1\\3\end{smallmatrix}}=\frac{1}{3}\{2f_{113}-f_{131}-f_{311}\}$$

$$f_{\begin{smallmatrix}1&2\\2\end{smallmatrix}}=\frac{1}{6}\{f_{122}-2f_{221}+f_{212}\}$$

$$f_{\begin{smallmatrix}1&3\\3\end{smallmatrix}}=\frac{1}{6}\{f_{133}-2f_{331}+f_{313}\}$$

$$f_{\begin{smallmatrix}2&2\\3\end{smallmatrix}}=\frac{1}{6}\{2f_{223}-f_{232}-f_{322}\}$$

$$f_{\begin{smallmatrix}2&3\\3\end{smallmatrix}}=\frac{1}{6}\{f_{233}-2f_{332}+f_{323}\}$$

$$f_{\begin{smallmatrix}1&2\\3\end{smallmatrix}}=\frac{1}{6}\{2f_{123}-f_{231}-f_{132}+2f_{213}-f_{132}-f_{321}\}$$

$$f_{\begin{smallmatrix}1&3\\2\end{smallmatrix}}=\frac{1}{6}\{2f_{132}-f_{321}-f_{231}+2f_{312}-f_{123}-f_{213}\}$$

另一个[21]不可约张量空间也是8维的，它们为

$$f'_{\begin{smallmatrix}1&1\\2\end{smallmatrix}}=\frac{1}{2}\{f_{121}-f_{211}\}$$

$$f'_{\begin{smallmatrix}2&2\\3\end{smallmatrix}}=\frac{1}{2}\{f_{232}-f_{322}\}$$

$$f'_{\begin{smallmatrix}1&1\\3\end{smallmatrix}}=\frac{1}{2}\{f_{131}-f_{311}\}$$

$$f'_{\begin{smallmatrix}2&3\\3\end{smallmatrix}}=\frac{1}{2}\{f_{233}-f_{323}\}$$

$$f'_{\begin{smallmatrix}1&2\\2\end{smallmatrix}}=\frac{1}{2}\{f_{122}-f_{212}\}$$

$$f'_{\begin{smallmatrix}1&2\\3\end{smallmatrix}}=\frac{1}{6}\{2f_{132}-2f_{312}+f_{231}+f_{123}-f_{213}-f_{321}\}$$

$$f'_{\begin{smallmatrix}1&3\\3\end{smallmatrix}}=\frac{1}{2}\{f_{133}-f_{313}\}$$

$$f'_{\begin{smallmatrix}1&3\\2\end{smallmatrix}}=\frac{1}{6}\{2f_{123}-2f_{213}+f_{321}+f_{132}-f_{312}-f_{231}\}$$

把这些结果与前面非标准 Young 算子得到的结果相比较，可看到标准 Young 算子是归一化的，而且每个 Young 算子中包括 $m!$个置换，即 Weyl 盘上所有方块上符号的全部置换.

3. 描述物理状态的不可约张量

前边讨论的不可约张量是抽象的，它们可具体化为描述多粒子量子体系状态的不可约张量.

如果我们用 n 维模型空间来研究多粒子问题. n 个正交归一化单粒子函数 φ_i，$i=1$，2，…，n 构成 n 维空间的基矢，它们在 $U(n)$ 群作用下的变化为

$$U\varphi_i = \sum_{j=1}^{n} u_{ij}\varphi_j$$

即 $\{\varphi_1, \varphi_2\cdots\varphi_n\}$ 为 $U(n)$ 群不可约表示[1]的基矢. 当研究 m 个粒子时，以

$$\Phi_{i_1,i_2\cdots i_m}(1,2,\cdots,m)=\varphi_{i_1}(1)\varphi_{i_2}(2)\cdots\varphi_{i_m}(m)$$

作为模型空间 $V_n^{\otimes m}$ 的基矢，也就是 m 秩张量，维数为 n^m. 称 i_1，$i_2\cdots i_m$ 为轨道指标，$i_k=1,2,\cdots,n$，它标明单个粒子占具的第 i_k 个轨道. 括号内的标号 $(1,2,\cdots,m)$ 为粒子指标，它标记第 k 个粒子占据某一个轨道 i_k.

$\Phi_{i_1,i_2\cdots i_m}(1,2,\cdots,m)$ 在 $U(n)$ 群算子 $\hat{P}(u)$ 作用下为

$$\begin{aligned}&\hat{P}(u)\Phi_{i_1,i_2\cdots i_m}(1,2,\cdots,m)\\&=\sum_{i_1',i_2'\cdots i_m'}u_{i_1'i_1}u_{i_2'i_2}\cdots u_{i_m'i_m}\Phi_{i_1',i_2'\cdots i_m'}(1,2,\cdots,m)\end{aligned}$$

即 $U(n)$ 群作用于轨道脚标. 而在置换群 S_m 元素 $\sigma=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & m\\ \sigma_1 & \sigma_1 & & \sigma_m\end{pmatrix}$ 作用下为

$$\begin{aligned}\sigma\Phi_{i_1,i_2\cdots i_m}(1,2,\cdots,m)&=\Phi_{i_1,i_2\cdots i_m}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_m)\\&=\varphi_{i_1}(\sigma_1)\varphi_{i_2}(\sigma_1)\cdots\varphi_{i_m}(\sigma_m)\end{aligned}$$

即 S_m 群作用于粒子脚标.

这里对置换群对张量 $\Phi_{i_1,i_2\cdots i_m}(1,2,\cdots,m)$ 作用的定义与(12.1.1)式的定义是完全一致的.

$$\sigma f_{i_1,i_2\cdots i_m}=f_{i_{\sigma_1}i_{\sigma_2}\cdots i_{\sigma_m}}$$

如果令

$$f_{i_1,i_2\cdots i_m}=\varphi_{i_1}(1)\varphi_{i_2}(2)\cdots\varphi_{i_m}(m)$$

则

$$\begin{aligned}\sigma f_{i_1,i_2\cdots i_m}&=\varphi_{i_1}(\sigma_1)\varphi_{i_2}(\sigma_2)\cdots\varphi_{i_m}(\sigma_m)\\&=\varphi_{i_{\sigma_1}}(1)\varphi_{i_{\sigma_2}}(2)\cdots\varphi_{i_{\sigma_m}}(m)\\&=f_{i_{\sigma_1}i_{\sigma_2}\cdots i_{\sigma_m}}\end{aligned}$$

这表明原来粒子 1 变为粒子 σ_1，粒子 2 变为 σ_2，…… 等价的表示为粒子的轨道由 i_1 变为 i_{σ_1}，粒子 2 的轨道变为 i_{σ_2}……. 轨道指标 i_1，$i_2\cdots i_m$ 本身并未发生变化，只是为不同粒子所占据.

当明确了张量 $\Phi_{i_1,i_2\cdots i_m}(1,2,\cdots,m)$ 有两套指标之后，$U(n)$ 群和 S_m 群分别作用这两套指标，因而它们是可交换的，就是自然的了.

前边已经指出一个不可约张量 $|[\lambda],\omega_i,(r)_j\rangle$ 由 $(r)_j$ 所代表的置换群 S_m 的标准 Young 盘和 ω_i 所代表的 Weyl 盘所描述，实质上标准 Young 盘标记了 m 个粒子编号的对称类型，而相应 Weyl 盘标明了 k 号粒子的轨道编号 i_k.

当用 Young 算子构造不可约张量时，Young 算子作用于粒子指标.

比如三秩张量

$$\Phi_{i_1,i_2,i_3}(1,2,3)=\varphi_{i_1}(1)\varphi_{i_2}(2)\varphi_{i_3}(3)$$

用 $\hat{Y}^{[3]}$ 作用后为

$$\begin{aligned}\hat{Y}^{[3]}\Phi_{i_1,i_2,i_3}(1,2,3) =\frac{1}{6}\{&\Phi_{i_1,i_2,i_3}(1,2,3)+\Phi_{i_1,i_2,i_3}(2,1,3)\\&+\Phi_{i_1,i_2,i_3}(1,3,2)+\Phi_{i_1,i_2,i_3}(3,2,1)\\&+\Phi_{i_1,i_2,i_3}(1,3,2)+\Phi_{i_1,i_2,i_3}(3,2,1)\}\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}\Phi_{i_1,i_2,i_3}(2,1,3)&=\varphi_{i_1}(2)\varphi_{i_2}(1)\varphi_{i_3}(3)\\&=\varphi_{i_2}(1)\varphi_{i_1}(2)\varphi_{i_3}(3)\\&=\varphi_{i_2,i_1,i_3}(1,2,3)\end{aligned}$$

等等，因而

$$\begin{aligned}Y^{[3]}\Phi_{i_1,i_2,i_3}(1,2,3) =\frac{1}{6}\{&\Phi_{i_1,i_2,i_3}(1,2,3)+\Phi_{i_2,i_1,i_3}(1,2,3)\\&+\Phi_{i_1,i_3,i_2}(1,2,3)+\Phi_{i_3,i_2,i_1}(1,2,3)\\&+\Phi_{i_1,i_3,i_2}(1,2,3)+\Phi_{i_3,i_2,i_1}\}\end{aligned}$$

与以前得到结果是一致的.

因而在一般张量中

$$\begin{aligned}\sigma f_{i_1,i_2\cdots i_m}=f_{i_{\sigma_1}i_{\sigma_2}\cdots i_{\sigma_m}}&=\varphi_{i_1}(\sigma_1)\varphi_{i_2}(\sigma_2)\cdots\varphi_{i_m}(\sigma_m)\\&=\varphi_{i_{\sigma_1}}(1)\varphi_{i_{\sigma_2}}(2)\cdots\varphi_{i_{\sigma_m}}(m)\end{aligned}$$

通过这种讨论，多粒子问题的张量与单粒子态乘积的关系就十分清晰了.

12.2 $U(n)$ 和 $SU(n)$ 群的不可约表示 Lie 代数方法

在这一节中用 Lie 代数方法简要讨论 $U(n)$ 和 $SU(n)$ 的不可约表示，主要在于证明不可约张量方法得到的以 $[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$ 标记的不可约表示，就是 Lie 代数中以最高权 $[\lambda]$ 标记的不可约表示，从而说明两种方法得到的不可约表示是一致的.

12.2.1 $U(n)$ 群和 $SU(n)$ 群的不可约表示

1. *$SU(n)$ 群不可约表示的最高权与 Young 图*

在第十章已讨论过单 Lie 代数以及相应 Lie 群的不可约表示，由最高权标记. 定理 10.2.5 指出构成最高权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的充要条件是

$$\Lambda_{\alpha_i}=\frac{2(\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\alpha}_i)}{(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_i)} \tag{10.2.13}$$

为非负整数，其中 $\boldsymbol{\Lambda}$ 为最高权，$\boldsymbol{\alpha}_i$ 为第 i 个素根.

在 n 维空间中取 n 个自然基矢，e_i，$i=1,2,\cdots,n$，其定义为

$$e_i = (\underbrace{0, 0, \cdots, 0}_{i}, 1, 0, \cdots, 0)$$

在这组基矢中，Lie 代数 $su(n)$ 的 $(n-1)$ 个素根为

$$\alpha_i = e_i - e_{i+1}, \quad i = 1, 2, \cdots, n-1$$

因而把 $(n-1)$ 维权空间的最高权在基矢 $\{e_i, i=1, 2, \cdots, n-1\}$ 中展开，为

$$\Lambda = \sum_{i=1}^{n-1} \Lambda_i e_i \tag{12.2.1}$$

而(10.2.1)式为

$$\begin{cases} \lambda_i = \dfrac{2}{(\alpha_i, \alpha_i)}(\Lambda, \alpha_i) = (\Lambda, e_i - e_{i+1}) = \Lambda_i - \Lambda_{i+1} \\ \qquad i = 1, 2, \cdots, n-2 \\ \lambda_{n-1} = (\Lambda, \alpha_{n-1}) = (\Lambda, e_{n-1} - e_n) = \Lambda_{n-1} \end{cases} \tag{12.2.2}$$

由于 $\lambda_i \geqslant 0$，因而 $\Lambda_i \geqslant \Lambda_{i+1}$，$\Lambda_i$ 是高最权 Λ 按基矢 $\{e_i, i=1, 2, \cdots, n-1\}$ 展开的分量.

最高权 Λ 在基矢 $\{e_i, i=1, 2, \cdots, n-1\}$ 中可表示为 $[\Lambda] = [\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_{n-1}]$，它们构成包括 $N = \sum_{i=1}^{n-1} \Lambda_i$ 个方块的 Young 图.（注意这里的 $[\Lambda] = [\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_{n-1}]$ 相当于不可约张量方程中的 $[\Lambda] = [\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n]$，这个不可约表示的最高权在自然基中展开为 $\Lambda = \sum_i \Lambda_i e_i$).

比如对 Lie 代数 $su(3)$ 的两个基本表示

$$\overset{1}{\bigcirc}\!-\!\bigcirc \quad 和 \quad \bigcirc\!-\!\overset{1}{\bigcirc}$$

基本表示 $[1, 0]$ 最高权在基矢 $\{e_i\}$ 中的分量分别为

$$\Lambda_1 = 1, \ \Lambda_2 = 0 \quad (因为\ \Lambda_1 - \Lambda_2 = 1)$$

相应 Young 图为 □，基本表示 $[0, 1]$ 为

$$\Lambda_1 - \Lambda_2 = 0, \quad \Lambda_2 = 1$$

因而 $\Lambda_1 = \Lambda_2 = 1$，相应 Young 图为 $\begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline \ \\ \hline\end{array}$.

Lie 代数 $su(n)$ 的不可约表示得到后通过指数映射就得到了 $SU(n)$ 群的不可约表示，因而 $SU(n)$ 群的不可约表示也可用最高权 $[\Lambda] = [\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_{n-1}]$ 或它所表示的 Young 图来标记. Λ_i 是最高权 Λ 在自然基 $\{e_i, i=1, 2, \cdots, n\}$ 中的坐标.

2. 不可约张量基矢的权与最高权

为了证明由 Lie 代数方法得到的不可约表示与由不可约张量方法得到的不可约表示的一致性，在本小节中来计算不可约张量的权与最高权.

$U(n)$ 群的 Lie 代数 $u(n)$ 虽然不是半单 Lie 代数，但是第十章讨论的以最高权标记的不可约表示仍然适用.

Lie 代数 $u(n)$ 的 C-W 基仍然为如下 $n \times n$ 的矩阵，即

$$(\varepsilon_{ij})_{kl} = \delta_{ik}\delta_{jl} \tag{12.2.3}$$

即 ε_{ij} 为 $n \times n$ 矩阵，它的矩阵元只有第 i 行第 j 列为 1，其它全为零. Lie 代数为

$$[\varepsilon_{ij}, \varepsilon_{kl}] = \delta_{jk}\varepsilon_{il} - \delta_{il}\varepsilon_{kj} \tag{12.2.4}$$

Cartan 子代数为 ε_{ii}，$i=1, 2, \cdots, n$.（Lie 代数 $su(n)$ 由于反 Hermitian 性的要求，它的 Cartan 算子要求是无迹矩阵，因而 n 个 ε_{ii} 并不全是独立的，只有 $n-1$ 个是独立的，在第九章中取为 $H_i = \frac{1}{i}[-\sum_{j=1}^{i-1}\varepsilon_{jj} + (i-1)\varepsilon_{ii}]$，$i=2, 3, \cdots, n$，以保证 $\mathrm{tr}H_i = 0$）. 对于 Lie 代数 $u(n)$，Cartan 子代数 h_n 中的任一元素为

$$\varepsilon(l_1 l_2 \cdots l_n) = \sum_{i=1}^{n} l_i \varepsilon_{ii} = \begin{pmatrix} l_1 & & & 0 \\ & l_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & l_n \end{pmatrix} \tag{12.2.5}$$

而且 Lie 代数 $u(n)$ 可表示为

$$\begin{cases} [\varepsilon(l_1 l_2 \cdots l_n), \varepsilon_{ij}] = (l_i - l_j)\varepsilon_{ij} \\ [\varepsilon(l_1 l_2 \cdots l_n), \varepsilon(l'_1 m'_2 \cdots l'_n)] = 0 \end{cases} \tag{12.2.6}$$

这表明 $l_i - l_j$ 为 Lie 代数 $u(n)$ 的一个根，$l_i - l_{i+1}$ 为素根.

如果 $|U_\Lambda\rangle$ 为以最高权 Λ 标记的不可约表示中属于最高权 Λ 的基矢，它是 ε_{ii} 的共同本征态，本征值为 Λ_i，即

$$\varepsilon_{ii}|U_\Lambda\rangle = \Lambda_i|U_\Lambda\rangle$$

则

$$\begin{aligned} \varepsilon(l_1 l_2 \cdots l_n)|U_\Lambda\rangle &= \sum_i l_i \varepsilon_{ii}|U_\Lambda\rangle = \sum_i l_i \Lambda_i |U_\Lambda\rangle \\ &\cong \sum_i l_i \Lambda_i |U_\Lambda\rangle = \Lambda |U_\Lambda\rangle \end{aligned} \tag{12.2.7}$$

即最高权

$$\Lambda = \sum_i \Lambda_i e_i \cong \sum_i \Lambda_i e_i \tag{12.2.8}$$

由于最高权的要求（即(12.2.1)式要求），当 $l \geqslant k$ 时，$\Lambda_l - \Lambda_k$ 为整数，当 $k < l$ 时，$\Lambda_k - \Lambda_l \geqslant 0$.

对于 $U(n)$ 群，$\varepsilon(l_1 l_2 \cdots l_n)$ 经指数映射为 $U(n)$ 的元素 H，即

$$H = \exp\{\varepsilon(l_1 l_2 \cdots l_n)\} = \begin{pmatrix} e^{l_1} & & & 0 \\ & e^{l_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{l_n} \end{pmatrix} \tag{12.2.9}$$

于是

$$H|U_n\rangle = \exp\{\varepsilon|U_n\rangle\} = \exp\{\sum_{i=1}^{n}\Lambda_i l_i\}|U_\Lambda\rangle \tag{12.2.10}$$

由于

$$H = \begin{pmatrix} e^{l_1} & & & 0 \\ & e^{l_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{l_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{l_1+2\pi i} & & & 0 \\ & e^{l_2+2\pi i} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{l_n+2\pi i} \end{pmatrix}$$

因而要求 Λ_i 为整数，此时

$$\exp\{\sum_{i=1}^{n}\Lambda_i(l_i+2\pi \mathrm{i})\}=\exp\{\sum_{i=1}^{n}\Lambda_i l_i\}$$

由 $U(n)$ 不可约表示最高权的这种性质，可证明由不可约张量 $\Lambda=[\Lambda_1,\Lambda_2,\cdots,\Lambda_n]$ 得到的不可约表示，就是最高权为

$$\Lambda=\sum_i \Lambda_i l_i=\sum \Lambda_i e_i$$

的不可约表示．下面就证明这一结论．

1° 不可约张量表示 $[1^s]$ 的权与最高权

不可约表示张量 $[1^s]$ 是 $\binom{n}{s}$ 维，即 $\{f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1\\\hline i_2\\\hline \vdots\\\hline i_s\\\hline\end{array}}, 1\leqslant i_1<i_2<i_s\leqslant n\}$，用(12.2.9)式定义的 $U(n)$ 群的 Cartan 元素 $H\in U(n)$ 作用于 $f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1\\\hline i_2\\\hline \vdots\\\hline i_s\\\hline\end{array}}$ 就得到了它的权，即

$$\begin{aligned}\hat{P}(H)f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1\\\hline i_2\\\hline \vdots\\\hline i_s\\\hline\end{array}}&=\sum_{i_1'i_2'\cdots i_s'}H_{i_1'i_1}H_{i_2'i_2}\cdots H_{i_s'i_s}f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1'\\\hline i_2'\\\hline \vdots\\\hline i_s'\\\hline\end{array}}\\&=\mathrm{e}^{l_{i_1}}\mathrm{e}^{l_{i_2}}\cdots\mathrm{e}^{l_{i_s}}f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1\\\hline i_2\\\hline \vdots\\\hline i_s\\\hline\end{array}}\\&=\exp\{l_{i_1}+l_{i_2}+\cdots+l_{i_s}\}f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1\\\hline i_2\\\hline \vdots\\\hline i_s\\\hline\end{array}}\end{aligned}$$

这说明 $f_{\begin{array}{|c|}\hline i_1\\\hline i_2\\\hline \vdots\\\hline i_s\\\hline\end{array}}$ 的权为

$$\lambda=l_{i_1}+l_{i_2}+\cdots+l_{i_s}\cong e_{i_1}+e_{i_2}+\cdots+e_{i_s}\qquad(12.2.11)$$

在 $\binom{n}{s}$ 个形如(12.2.11)式的权中，按最高权的定义，最高权 Λ 为

$$\begin{aligned}\Lambda&=e_1+e_2+\cdots+e_s+0+0+\cdots+0\\&\equiv[\underbrace{1,1,\cdots,1}_{s},0,0,\cdots,0]\\&=[1^s]\end{aligned}$$

相应的张量为 $f_{\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline \vdots\\\hline s\\\hline\end{array}}$．其它张量的权都比这个权低．如 $[\underbrace{1,1,1,\cdots,1}_{s-1},0,1,0\cdots0]$ 对应的张量为 $f_{\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline \vdots\\\hline s-1\\\hline\end{array}}$．

Weyl 盘规则要求 $i_1\geqslant i_2\geqslant\cdots\geqslant i_{f_1}$, $j_1\geqslant j_2\geqslant\cdots\geqslant j_{f_2}\cdots\cdots k_1\geqslant k_2\geqslant\cdots\geqslant k_{f_n}$ 同时 $i_i>j_i>\cdots$

$> k_i$.

2° 以 Weyl 盘 ω 标记的不可约张量的权与最高权

对于不可约表示$[f_1, f_2, \cdots, f_n]$的张量可由 Weyl 盘 ω 标记，即f_ω. Weyl 盘 ω 有 $\sum_{i=1}^{n} f_i$ 个指标.

用(12.2.9)表示的 $U(n)$群中的元素 H 的算子 $\hat{P}(H)$作用f_ω 得到

$$\begin{aligned}
&\hat{P}(H)f_\omega \\
&= \sum_{i_1'\cdots i_f'} \cdots \sum_{l_1'\cdots l_{f_n}'} H_{i_1 i_1'} H_{i_2 i_2'} \cdots H_{k_{f_n} k_{f_n}'} H_\omega \\
&= \exp\{e_{i_1} + e_{i_2} + \cdots + e_{f_1} + e_{j_1} + \cdots + e_{j_{f_2}} + \cdots + e_{k_1} + \cdots + e_{k_{f_n}}\} f_\omega \qquad (12.2.12)
\end{aligned}$$

这样便得到了以 Weyl 盘 ω 标记的不可约张量的权.

$$\lambda_\omega = [e_{i_1} + e_{i_2} + \cdots + e_{f_1} + e_{j_1} + \cdots + e_{j_{f_2}} + \cdots + e_{k_1} + \cdots + e_{k_{f_n}}] \qquad (12.2.13)$$

显然不可约表示$[f_1, f_2, \cdots, f_n]$的 $D_{[f_1, f_2, \cdots, f_n]}$个具体 Weyl 盘所标记的不可约张量的 ω 得到形如(12.2.13)式所表示的 $D_{[f_1, f_2, \cdots, f_n]}$个权(当然其中有重复的退化权). 按最高权的定义，$D_{[f_1, f_2, \cdots, f_n]}$个(12.2.13)式所表示的权中最高权为

$$\Lambda = (f_1 e_1 + f_2 e_2 + \cdots + f_n e_n)$$

相当 Weyl 盘为

$$\begin{cases} i_1 = i_2 = \cdots = i_{f_1} = 1 \\ j_1 = j_2 = \cdots = j_{f_2} = 2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ k_1 = k_2 = \cdots = k_{f_n} = n \end{cases} \qquad \left(\sum_{i=1}^{n} f_i = m\right)$$

记为ω_Λ. 因而$[f_1, f_2, \cdots, f_n]$就是这个不可约表示的最高权在权空间自然基矢(e_i, $i=1, \cdots, n$)下的表达形式.

对于其它 Weyl 盘，也可由填充的 i_1, $i_2 \cdots i_{f_1} i_{f_1+1} \cdots i_n$ 具体计算出它的权.

作为例子，给出 $U(3)$群三种三秩不可约张量所对应的权. 因为权空间是三维的，权空间自然基矢为 e_1, e_2, e_3, 具体的权为

$$\lambda = \lambda_1 e_1 + \lambda_2 e_2 + \lambda_3 e_3 = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$$

下面对三种对称类型的 Weyl 盘标出相应的权$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$.

1 1 1	2 2 2	3 3 3	1 1 2	1 1 3
(300)	(030)	(003)	(210)	(201)
1 2 2	1 2 3	1 3 3	2 2 3	2 3 1
(120)	(111)	(102)	(021)	(012)

$\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}$ (111)　$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$ (210)　$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$ (201)　$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$ (120)　$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$ (111)

$\begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$ (021)　$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$ (111)　$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$ (102)　$\begin{array}{|c|c|}\hline 2&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$ (012)

3. $SU(n)$群不可约张量的权与最高权

对于 $SU(n)$群，由于(12.2.5)式定义的 Cartan 子代数是反 Hermitian 矩阵，因而

$$\varepsilon(e_1, e_2, e_3, \cdots, e_n) = \sum_{i=1}^{n} e_i \varepsilon_i = \begin{pmatrix} e_1 & & & 0 \\ & e_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e_n \end{pmatrix}, \quad \sum_{i=1}^{n} e_i = 0$$

由(12.2.13)式容易得到 $SU(n)$群的最高权为

$$\Lambda = \{(f_1 - f_n)e_1 + (f_2 - f_n)e_2 + \cdots + (f_{n-1} - f_n)e_{n-1}\} \tag{12.2.14}$$

因而 $SU(n)$群的最高权为

$$[f_1 - f_n, f_2 - f_n, \cdots, f_{n-1} - f_n] = [f_1', f_2', \cdots, f_{n-1}']$$

在 12.1 节中已证明了

$$U(n) \longrightarrow SU(n)$$

$$[f_1, f_2, \cdots, f_n] \backsimeq [f_1 - f_n, f_2 - f_n, \cdots, f_{n-1} - f_n 0] = [f_1', f_2', \cdots, f_{n-1}']$$

这说明 $SU(n)$群权空间是$(n-1)$维的，因而$(n-1)$行的 Young 图$[f_1, f_2, \cdots, f_{n-1}]$就直接标记了最高权.

4. $U(n)$群不可约表示$[\Lambda] = [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$的 Casimir 算子本征值

由(10.5.4)式给出的 Casimir 算子 $\hat{C}_2$ 的本征值公式

$$\hat{C}_2 |\Lambda\rangle = (\Lambda + 2g, \Lambda) |\Lambda\rangle \tag{10.5.14}$$

可计算 $U(n)$群不可约表示$[\Lambda]$的本征值，最高权

$$\Lambda = \lambda_1 e_1 + \lambda_2 e_2 + \cdots + \lambda_n e_n$$

$U(n)$群的正根为 $e_i - e_j$, $j > i$，共$\frac{n(n+1)}{2}$个. 可计算出正根之和的一半.

$$g = \frac{1}{2} \sum_{i<j} (e_i - e_j) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (n - 2i + 1) e_i$$

把它们代入 Casimir 算子本征值公式得到

$$(\Lambda + 2g\Lambda) = \sum_{i}^{n} [\lambda_i^2 + \lambda_i (n - 2i + 1)] \tag{12.2.15}$$

这个结果也可由 Casimir 算子

$$\hat{C}_2 = \sum_i H_i^2 + \sum_{j<k} E_{jk} E_{kj}$$

直接作用于最高权对应的不可约张量而得到.

12.2.2 $U(n)$群的特征标

在12.1节中已给出了$U(n)$群的特征标，在本节中用Weyl发展的方法(参见Weyl等"The Classical Groups")证明$U(n)$群的特征标.

由于$U(n)$群由$n\times n$酉矩阵构成，因而Lie代数$u(n)$基矢为$n\times n$的反Hermitian矩阵构成，它的Cartan子代数的基为$\mathrm{i}\varepsilon_{kk}=\mathrm{i}\varepsilon_k$(在上节中只取$\varepsilon_k$，而没乘虚数i，因为在上节中还没有具体涉及反Hermitian矩阵问题，不引入i比较简单). $\mathrm{i}\varepsilon_1$，$\mathrm{i}\varepsilon_2$，…，$\mathrm{i}\varepsilon_n$构成Lie代数$U(n)$的Cartan子代数h_m的基，Cartan子代数h_m为

$$h_m=\left\{\begin{pmatrix}\mathrm{i}\varphi_1 & & & 0\\ & \mathrm{i}\varphi_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \mathrm{i}\varphi_n\end{pmatrix},\quad \sum_{k=1}^{n}\mathrm{i}\varphi_k\varepsilon_k,\quad \varphi_k\in\mathbf{R}\right\}\tag{12.2.15'}$$

这个子代数经过指数映射得到$U(n)$群的可交换子群H_m，即

$$H_n=\left\{\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1} & & & 0\\ & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_n}\end{pmatrix}=\Phi(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)\right\}$$

$\Phi(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$为由实参数$\varphi_i$描述的对角酉矩阵，全部对角酉矩阵构成$U(n)$群的可交换子群$H_n$.

任何一个$n\times n$酉矩阵$A\in U(n)$，都可由$U\in U(n)$进行对角化，即

$$UAU^+=\Phi$$

因而任何$A\in U(n)$都与特定的$\Phi(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$共轭，也就是说子群$H_n$包括了$U(n)$的全部共轭类. 在子群$H_m$中，对角元相同，只是顺序不同的$\Phi(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$与$\Phi(\varphi_{i_1},\varphi_{i_2},\cdots,\varphi_{i_n})$共轭，

$$\sigma(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)=(\varphi_{i_1},\varphi_{i_2},\cdots,\varphi_{i_n})$$

由(12.2.15)式可看到$0\leqslant\varphi_i\leqslant\pi$，因而可交换子群$H_n$，可由$n$个实参数$\varphi_i$描述，参数定义域为$0\leqslant\varphi_i\leqslant 2\pi$. $U(n)$群所有定义在类上的函数都可由子群H_n来讨论，特征标$\chi^{[\Lambda]}$是类函数，因而只讨论子群H_n的特征标就可以了. 对于以φ_1，φ_2，…，φ_n描述的类的特征标为

$$\chi^{[\Lambda]}(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$$

而且$\chi^{[\Lambda]}(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)$对于交换$\varphi_i$，$\varphi_j$是不变的，即$\varphi_i$的对称函数.

1. $U(n)$群的参数选取及群上积分

$U(n)$群包括n^2个连续实参数，除了子群H_n的n个参数φ_1，φ_2，…，φ_n外，还有n^2-n个参数. 这n^2-n个参数取为b_1，b_2，…，b_{n^2-n}，并令$\varepsilon_j=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_j}$，则可以证明(见Weyl著作)群空间的积分元$\mathrm{d}A$为

$$\begin{cases} \mathrm{d}A = \prod_{j\neq k} \mid \varepsilon_j/\varepsilon_k - 1 \mid \mathrm{d}\omega_u \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 \cdots \mathrm{d}\varphi_n \\ \mathrm{d}\omega_u = \omega(b_1, b_2, \cdots, b_{m^2-m}) \mathrm{d}b_1 \mathrm{d}b_2 \cdots \mathrm{d}b_{m^2-m} \end{cases} \tag{12.2.16}$$

令

$$\Delta(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n) = \prod_{j<k} (\varepsilon_j - \varepsilon_k) \tag{12.2.17}$$

群积分元

$$\mathrm{d}A = \mathrm{d}\omega_u \Delta\Delta^* \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 \cdots \mathrm{d}\varphi_n \tag{12.2.18}$$

因而定义在 $U(n)$ 群上的函数 $f(b_1, b_2, \cdots, b_{n^2-1}; \varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n)$ 在群空间的积分为

$$\int_{U(n)} f\mathrm{d}A = \int \mathrm{d}\omega_u \int f(b_1, b_2, \cdots, b_{n^2-n}; \varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n)$$

$$\Delta\Delta^* \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 \cdots \mathrm{d}\varphi_n \tag{12.2.19}$$

对于类函数 $f(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n)$ 群上积分为

$$\int_{U(n)} f\mathrm{d}A = \int \mathrm{d}\omega_n \int f(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n) \Delta\Delta^* \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 \cdots \mathrm{d}\varphi_n$$

$$= \Omega \int f(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n) \Delta\Delta^* \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 \cdots \mathrm{d}\varphi_n \tag{12.2.20}$$

其中 Ω 为群参数 $b_1, b_2, \cdots, b_{n^2-n}$ 在群空间中的体积.

2. $U(n)$ 群的特征标

令 f, g 都是类的函数，即 $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$ 的对称函数，它们的内积定义为

$$(f, g) = V^{-1} \int_0^{2\pi} \cdots \int_0^{2\pi} f(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n) g(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n)^* \Delta\Delta^* \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 \cdots \mathrm{d}\varphi_n \tag{12.2.21}$$

其中

$$V = \int_0^{2\pi} \cdots \int_0^{2\pi} \Delta\Delta^* \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 \cdots \mathrm{d}\varphi_n \tag{12.2.22}$$

注意，由于类函数 $f(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n)$ 是 φ_i 的对称函数，因而取 $\varphi_1 \geqslant \varphi_2 \geqslant \varphi_3 \geqslant \cdots \geqslant \varphi_n$. 在(12.2.21)式的积分增加了 $n!$ 倍，因为积分中并不考虑 φ_i 的置换对称性. 然而在体积元积分(12.2.22)式中，对群体积也增大了 $n!$ 倍. (12.2.22)式对类函数内积是正确的.

对于 $U(n)$ 群的不可约表示 $\Lambda = [\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n]$，如果它的维数为 s，基矢为 $|\Lambda, \lambda_i\rangle$, $i = 1, 2, \cdots, s$, λ_i 为 s 个权，$\lambda_1 = \Lambda$ 为最高权. 对应于 $\Phi(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n) \in H_n$ 的表示矩阵为

$$D(\Phi) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda_1(\varphi)} & & & 0 \\ & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda_2(\varphi)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda_s(\varphi)} \end{pmatrix}$$

其中

$$\exp\{\mathrm{i}\lambda_j(\varphi)\} = \exp\{\mathrm{i}\lambda_j(\varphi_1, \cdots, \varphi_n) = \varepsilon_1^{p_1} \cdots \varepsilon_m^{p_m}\} \tag{12.2.23}$$

权 λ_j 为

$$\lambda_j = p_1\varphi_1 + \cdots + p_n\varphi_n \tag{12.2.24}$$

因而特征标为

$$\chi(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n) = \mathrm{tr}D(\Phi) = \sum_{P_j} C_{p_1\cdots p_n}\varepsilon_1^{p_1}\varepsilon_2^{p_2}\cdots\varepsilon_n^{p_n} \tag{12.2.25}$$

$C_{p_1\cdots p_n}$为权$(p_1, p_2, \cdots, p_n)$的重复度. 重复度 $C_{p_1\cdots p_n}$为正整数，而且对交换 $p_1, p_2, \cdots, p_n$ 是对称函数. 即对 $p_1, \cdots, p_n$ 置换时重复度 $C_{p_1p_2\cdots p_n}$是相同的.

因而对于不可约表示$[\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n]$的最高权 $\Lambda = [\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_n]$的特征标(12.2.25)式中 $C_{p_1\cdots p_n} = 1$(最高权的基矢是不退化的)，因而(12.2.25)式变为

$$\chi(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n) = \varepsilon_1^{f_1}\varepsilon_2^{f_2}\cdots\varepsilon_n^{f_n} + \sum_{P_j(j\neq 1)} C_{p_1\cdots p_n}\varepsilon_1^{p_1}\cdots\varepsilon_n^{p_n} \tag{12.2.26}$$

定义

$$\zeta(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n) = \chi(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)\Delta(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n) \tag{12.2.27}$$

其中

$$\Delta(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n) = \prod_{j<k}(\varepsilon_j - \varepsilon_k)$$

对交换 ε_i，ε_j 是反对称的. 而$\chi(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)$(注意 $\varepsilon_j = \mathrm{e}^{i\varphi_i}$)对交换 ε_i，ε_j 是对称的，因而$\zeta(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)$对交换 $\varepsilon_i\varepsilon_j$ 是反对称的. 因而(12.2.27)式可展开为

$$\zeta = \sum_{q_i} d_{q_1, q_2, \cdots, q_n}\varepsilon_1^{q_1}\varepsilon_2^{q_2}\cdots\varepsilon_n^{q_n} \tag{12.2.28}$$

$d_{q_1, q_2, \cdots, q_n}$是整数，其中最高次幂的项为

$$\varepsilon_1^{f_1+n-1}\varepsilon_2^{f_2+n-2}\cdots\varepsilon_{n-1}^{f_{n-1}+1}\varepsilon_n^{f_n} = \varepsilon_1^{h_1}\varepsilon_2^{h_2}\cdots\varepsilon_n^{h_n}$$

其中

$$h_i = f_i + n - i,\quad h_1 > h_2 > \cdots h_n$$

因而 ζ 中含有

$$\zeta(h_1, h_2, \cdots, h_n) = \sum_{S\in S_m}\delta_s\varepsilon_{s(1)}^{h_1}\varepsilon_{s(2)}^{h_2}\cdots\varepsilon_{s(n)}^{h_n} = |\varepsilon^{h_1}\varepsilon^{h_2}\cdots\varepsilon^{h_m}| \tag{12.2.28'}$$

δ_s 为置换

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ s(1) & s(2) & \cdots & s(n) \end{pmatrix}$$

的宇称，其值为

$$\delta_s = \begin{cases} 1, & s\text{ 为偶置换} \\ -1, & s\text{ 为奇置换} \end{cases}$$

而

$$|\varepsilon^{h_1}\varepsilon^{h_2}\cdots\varepsilon^{h_n}| = \det\begin{pmatrix} \varepsilon_1^{h_1} & \varepsilon_1^{h_2} & \cdots & \varepsilon_1^{h_n} \\ \varepsilon_2^{h_1} & \varepsilon_2^{h_2} & \cdots & \varepsilon_2^{h_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varepsilon_n^{h_1} & \varepsilon_n^{h_2} & \cdots & \varepsilon_n^{h_n} \end{pmatrix} \tag{12.2.29}$$

于是，(12.2.27)式类似于(12.2.26)式可分解为

$$\zeta = \zeta(h_1, h_2, \cdots, h_n) + C'\zeta(h_1', h_2', \cdots, h_n') + C''\zeta(h_1'', h_2'', \cdots, h_n'') + \cdots \tag{12.2.30}$$

其中 $\zeta(h_1', h_2', \cdots, h_n')$ 是 $h_i' < h_n$ 的多项式(12.2.29)，$\zeta(h_1'', h_2'', \cdots, h_n'')$ 为 $h_i'' < h_n$ 的多项式(12.2.29). 因为 ζ 是有限项的多项式，这种分解也是有限的.

容易看到积分

$$\int_0^{2\pi}\cdots\int_0^{2\pi}\varepsilon_1^{p_1}\varepsilon_2^{p_2}\cdots\varepsilon_n^{p_n}[\varepsilon_1^{q_1}\varepsilon_2^{q_2}\cdots\varepsilon_n^{q_n}]^*\mathrm{d}\varphi_1\mathrm{d}\varphi_2\cdots\mathrm{d}\varphi_n = (2\pi)^n\delta_{q_1p_1}\delta_{q_2p_2}\cdots\delta_{q_np_n} \tag{12.2.31}$$

因而积分

$$\int_0^{2\pi}\cdots\int_0^{2\pi}\zeta(h_1, h_2, \cdots, h_n)[\zeta(h_1', h_2', \cdots, h_n')]^*\mathrm{d}\varphi_1\cdots\mathrm{d}\varphi_n = \prod_{i=1}^{n}\delta_{h_ih_i'}(2\pi)^n n! \tag{12.2.32}$$

因而 $n!$ 是由 $\zeta\zeta'$ 对 h_i，h_j 置换具有对称性而引入的.

于是特征标的内积为

$$(\chi, \chi) = V^{-1}\int_0^{2\pi}\cdots\int_0^{2\pi}|\chi\Delta|^2\mathrm{d}\varphi_1\mathrm{d}\varphi_2\cdots\mathrm{d}\varphi_n = 1 + |C'|^2 + |C''|^2 + \cdots \tag{12.2.33}$$

其中类的体系 V 为

$$\begin{aligned} V &= \int_0^{2\pi}\cdots\int_0^{2\pi}\Delta\Delta^*\mathrm{d}\varphi_1\mathrm{d}\varphi_2\cdots\mathrm{d}\varphi_n \\ &= \int_0^{2\pi}\cdots\int_0^{2\pi}|\zeta(n-1, n-2, \cdots, 1, 0)|^2\mathrm{d}\varphi_1\mathrm{d}\varphi_2\cdots\mathrm{d}\varphi_n \\ &= (2\pi)^n n! \end{aligned} \tag{12.2.34}$$

对于不可约表示$[f]$，特征标$\chi^{[f]}$的内积为 1，即：

$$(\chi^{[f]}, \chi^{[f]}) = 1$$

因而不可约表示展开式(12.2.30)式中 $C' = C'' = 0$，从而得到不可约表示$[f] = [f_1, f_2, \cdots, f_n]$的特征标为

$$\chi^{[f]} = |\varepsilon^{h_1}, \varepsilon^{h_2}, \cdots, \varepsilon^{h_n}|/\Delta(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_n)$$

这就是 12.1 节中给出的特征标表达式.

12.2.3　$U(n)$群不可约表示的正则基——Gelfand 基

在 7.7 节中我们讨论了置换群群链 $S_m \supset S_{m-1} \supset \cdots \supset S_2 \supset S_1$ 的标准不可约表示的基矢. 对于 $U(n)$群也存在类似的群链

$$U(n) \supset U(n-1) \supset \cdots \supset U(2) \supset U(1)$$

也可构造整个酉群链的不可约表示的基矢，这种基矢称为酉群的正则基，或称 Gelfand-Tsetlin 基，这种基是由 Gelfand 和 Tsetlin 在 1950 年提出的(参见 Gelfand I M, Tsetlin M L, Dokl Akad, SSSR, 1950, 71, 825).

为了给出这种正则基，首先不加证明地介绍一个定理，即

定理 12.2.1 $U(n)$群的不可约表示$\Lambda_n=(m_{1n}, m_{2n}, \cdots, m_{nn})$对于子群$U(n-1)$是可约表示，它可分解为不可约表示$\Lambda_{n-1}=(m_{1n-1}, m_{2n-1}, \cdots, m_{n-1,n-1})$的直和，$U(n-1)$群的不可约表示$\Lambda_{n-1}$满足条件

$$m_{in}\geqslant m_{in-1}\geqslant m_{i+1,n} \tag{12.2.35}$$

因而酉群链

$$U(n)\supset U(n-1)\supset\cdots\supset U(2)\supset U(1)$$

的正则基可用整个群链的最高权Λ_n, Λ_{n-1}, $\cdots$, Λ_1来标记，即

$$|(m)\rangle=\begin{vmatrix}\Lambda_n\\ \Lambda_{n-1}\\ \vdots\\ \Lambda_1\end{matrix}\Bigg\rangle\equiv\begin{vmatrix}m_{1n} & m_{2n} & \cdots & m_{nn}\\ & m_{1,n-1} & \cdots & m_{n-1,n-1}\\ & & \ddots & \vdots\\ & & & m_{11}\end{matrix}\Bigg\rangle \tag{12.2.36}$$

根据定理 12.2.1 各子群权的分量满足条件

$$m_{ij}\geqslant m_{ij-1}\geqslant m_{i+1,j},\quad j=1, 2, \cdots, n,\quad i=1, 2, \cdots, j \tag{12.2.37}$$

一般称(12.2.36)的符号为 Gelfand 盘.

以群链$U(3)\supset U(2)\supset U(1)$为例，不可约表示的分解规则为

$U(3)\supset U(2)$

[300]→[30]⊕[20]⊕[10]⊕[00]
(10)　(4) + (3) + (2) + (1)

[111]→[11]
(1)　(1)

[210]→[21]⊕[20]⊕[11]⊕[10]
(8)　(2) + (3) + (1) + (2)

$U(3)\supset U(2)$

[111]→[11]
(1)　(1)

$U(2)\supset U(1)$

[30]→[3] +[2]+[1]+[0]
(4)　(1) +(1)+(1)+(1)

[20]→[2] +[1]+[0]
(3)　(1) +(1)+(1)

[10]→[1] +[0]
2　(1) +(1)

[11]→[1]

[00]→[0]
(1)　(1)

其中[　]下面的数字为这个不可约表示的维数.

把这种不可约分解表示写成 Gelfand 盘，就得到了 Gelfand 基，它们为

$$\begin{vmatrix}3 & & 0 & & 0\\ & 3 & & 0 & \\ & & 3 & & \end{matrix}\Bigg\rangle,\quad \begin{vmatrix}3 & & 0 & & 0\\ & 3 & & 0 & \\ & & 2 & & \end{matrix}\Bigg\rangle,\quad \begin{vmatrix}3 & & 0 & & 0\\ & 3 & & 0 & \\ & & 1 & & \end{matrix}\Bigg\rangle,\quad \begin{vmatrix}3 & & 0 & & 0\\ & 3 & & 0 & \\ & & 0 & & \end{matrix}\Bigg\rangle$$

$$
\left|\begin{matrix}3 & & 0 & & 0\\ & 2 & & 0 & \\ & & 2 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}3 & & 0 & & 0\\ & 2 & & 0 & \\ & & 1 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}3 & & 0 & & 0\\ & 2 & & 0 & \\ & & 0 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}3 & & 0 & & 0\\ & 1 & & 0 & \\ & & 1 & & \end{matrix}\right\rangle
$$

$$
\left|\begin{matrix}3 & & 0 & & 0\\ & 1 & & 0 & \\ & & 0 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}3 & & 0 & & 0\\ & 0 & & 0 & \\ & & 0 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}1 & & 1 & & 1\\ & 1 & & 1 & \\ & & 1 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}2 & & 1 & & 0\\ & 2 & & 1 & \\ & & 2 & & \end{matrix}\right\rangle
$$

$$
\left|\begin{matrix}2 & & 1 & & 0\\ & 2 & & 1 & \\ & & 1 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}2 & & 1 & & 0\\ & 2 & & 0 & \\ & & 2 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}2 & & 1 & & 0\\ & 2 & & 0 & \\ & & 1 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}2 & & 1 & & 0\\ & 2 & & 0 & \\ & & 0 & & \end{matrix}\right\rangle
$$

$$
\left|\begin{matrix}2 & & 1 & & 0\\ & 1 & & 1 & \\ & & 1 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}2 & & 1 & & 0\\ & 1 & & 0 & \\ & & 1 & & \end{matrix}\right\rangle,\quad
\left|\begin{matrix}2 & & 1 & & 0\\ & 1 & & 0 & \\ & & 0 & & \end{matrix}\right\rangle
$$

Gelfand 基最大的优点是它对 $U(n)$ 群无穷小生成元 E_{ij}，$H_i = E_{ii}$的矩阵很容易得到解析表达式.

H_i 为 Cartan 算子或称权算子，不可约表示基矢是权算子的本征态，本征值为有关的权. $E_{ij}(i<j)$ 是权的升算子，$E_{ij}(i>j)$ 是权的降算子. 对于 Gelfand 基这些算子的矩阵元有很简单的解析表达式. 现把这些公式引述如下.

$$
H_i|(m)\rangle = \left(\sum_{j=1}^{i} m_{ji} - \sum_{j=1}^{i-1} m_{ji-1}\right)|(m)\rangle \tag{12.2.38}
$$

$$
\begin{aligned}
&\langle (m')_r^s | E_{r+1,r} | (m)\rangle \\
&= \left[-\frac{\prod\limits_{i=1}^{r+1}(m_{ir+1} - m_{sr} + s - i + 1)}{\prod\limits_{i\neq s}(m_{ir} - m_{sr} + s - i)}\right]\left[\frac{\prod\limits_{i=1}^{r-1}(m_{ir-1} - m_{sr} + s - i)}{\prod\limits_{i\neq s}(m_{ir} - m_{sr} + s - i + 1)}\right]
\end{aligned} \tag{12.2.39}
$$

这些公式在使用 Gelfand 基研究具体问题时是很有用的. 关于这方面问题可参阅文振冀著《酉群方法的理论与应用》.

12.3　$O(n)$ 群的不可约表示与不可约张量方法

由 $n\times n$ 的实正交矩阵构成的群称为 n 维实正交群，记为 $O(n)$，即

$$
O(n) = \{A \in U(n) \mid \tilde{A} = A^{-1},\ A^* = A\}
$$

由于条件

$$
\tilde{A}A = A\tilde{A} = E
$$

导致 $n\times n$ 个矩阵元 a_{ij}满足条件

$$
\sum_j \tilde{a}_{ij}a_{jk} = \sum^{j} a_{ji}a_{jk} = \delta_{ik}, \qquad \sum_j a_{ij}\tilde{a}_{jk} = 12a_{ij}a_{kj} = \delta_{ik}
$$

因而有$\dfrac{n(n-1)}{2}$个独立参数. 为$\dfrac{n(n-1)}{2}$阶的非连通紧致 Lie 群，由于

$$
\det A = \pm 1
$$

因而存在两个不连通的区域，这两个不连通的区域由分立参数$(-1)^l$决定，$l=0$为包括单位元的连通区域，另一个为$l=1$的包括元素$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$的连通区域. $l=0$的叶上的元素构成子群$SO(n)$，它是$O(n)$群的不变子群，整个群可写为

$$O(3)=I\otimes SO(n), \quad I=\{E, I\} \text{为反演群}$$

12.3.1 $O(n)$群的不可约张量表示

1. 张量的收缩与无迹张量

对m秩张量定义一种运算，称为收缩(Contraction)，即

$$\sum_{i_p i_k} \delta_{i_k i_p} f_{i_1 i_2 \cdots i_k \cdots i_k \cdots i_m} = f^{(k,p)}_{i_1 i_2 \cdots i_{k-1} i_{k+1} \cdots i_{p-1} i_{p+1} \cdots i_m} \tag{12.3.1}$$

这种运算是首先取$i_k=i_p$，然后对i_k求和，结果使m秩张量收缩为$(m-2)$秩张量，也称为m秩张量的对偶迹(pair tzac). 这种收缩运算对m秩张量的任意两个指标都可进行，因而m秩张量有$\frac{m(m-1)}{2}$种收缩运算.

如果张量收缩后为零，则称为无迹张量(traceless tensor).

任意张量$f_{i_1, i_2, \cdots, i_m}$都可唯一地分解为一个无迹张量$f^{(0)}_{i_1, i_2, \cdots, i_m}$和另一个张量$\varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_m}$之和，即

$$f_{i_1, i_2, \cdots, i_m} = \varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_m} + f^{(0)}_{i_1, i_2, \cdots, i_m} \tag{12.3.2}$$

其中$\varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_m}$的一般形式为

$$\varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_m} = \delta_{i_1 i_2} G^{(12)}_{i_3 i_4 \cdots i_m} + \cdots + \delta_{i_\alpha i_\beta} G^{(\alpha\beta)}_{i_1 \cdots i_{\alpha-1} i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1} \cdots i_m} + \cdots \tag{12.3.3}$$

上式求和中共$\frac{m(m-1)}{2}$项. 通常把所有的$\varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_m}$记为张量子空间$\Sigma$，把无迹张量记为子空间$F^0$. 则张量空间$V_n^{\otimes m}$分为两个子空间，

$$V_n^{\otimes m} = \Sigma \oplus F^0 \tag{12.3.4}$$

对张量$f_{i_1, i_2, \cdots, i_m} = \varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_m} + f^0_{i_1, i_2, \cdots, i_m}$进行收缩，可得到

$$f^{(\alpha, \beta)}_{i_1 i_2 \cdots i_{\alpha-1} i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1} \cdots i_m} = G^{(\alpha\beta)}_{i_1 \cdots i_{\alpha-1} i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1} \cdots i_m}$$

而且这两个子空间是正交的，即

$$(F^0, \varphi)_{i_1, i_2, \cdots, i_m} = F^0_{i_1, i_2, \cdots, i_m} \varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_m} = 0$$

上面的讨论可参阅 Hamermesh 的著作.

2. m秩张量的正交变换与收缩运算是可交换的

与$U(n)$群作用于张量一样定义$O(n)$元素的算子$\hat{P}(A)$作用于张量为

$$[\hat{P}(A)F]_{i_1, i_2, \cdots, i_n} = \sum_{i_1', i_2', \cdots, i_m'} a_{i_1' i_1} a_{i_2' i_2} \cdots a_{i_m' i_m} f_{i_1', i_2', \cdots, i_m'} = f'_{i_1, i_2, \cdots, i_n} \tag{12.3.5}$$

现在对$f'_{i_1, i_2, \cdots, i_m}$做收缩运算，即

$$\begin{aligned} f^{(\alpha, \beta)}_{i_1 i_{\alpha-1} i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1}} &= \sum_{i_\alpha} f'_{i_1 \cdots i_{\alpha-1} i_\alpha i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_\alpha i_{\beta+1} \cdots i_m} \\ &= \sum_{i_\alpha} \sum_{i_1', i_2', \cdots, i_m'} a_{i_1' i_1} a_{i_2' i_2} \cdots a_{i_\alpha' i_\alpha} \cdots a_{i_\beta' i_\alpha} \cdots a_{i_m' i_m} f_{i_1', i_2', \cdots, i_m'} \end{aligned}$$

由于 $\sum\limits_{i_\alpha} a_{i'_\alpha i_\alpha} a_{i'_\beta i_\alpha} = \delta_{i'_\alpha i'_\beta}$，于是得到

$$
\begin{aligned}
f^{(\alpha,\beta)}_{i_1 i_{\alpha-1} i_{\alpha+1}\cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1}\cdots i_m} &= \sum_{i'_1, i'_2, \cdots, i'_m} \delta_{i'_\alpha i'_\beta} \cdots a_{i'_1 i_1} a_{i'_2 i_2} \cdots a_{i'_{\alpha-1} i_{\alpha_1}} a_{i'_{\alpha+1} i_{\alpha_1}} \\
&\quad \cdots a_{i'_{\beta-1} i_{\beta-1}} a_{i_{\beta+1}' i_{\beta+1}} \cdots a_{i'_m i_m} f_{i'_1, i'_2, \cdots, i'_m} \\
&= \sum_{i'_1, \cdots, i'_{\alpha-1} i'_{\alpha+1} \cdots i'_{\beta-1} i'_{\beta+1} \cdots i'_m} a_{i'_1 i_1} \cdots a_{i'_{\alpha-1} i_{\alpha_1}} a_{i'_{\alpha+1} i_{\alpha_1}} \\
&\quad \cdot \cdots a_{i'_{\beta-1} i_{\beta-1}} a_{i'_{\beta+1} i_{\beta+1}} \cdots a_{i'_m i_m} f_{i'_1 \cdots i'_{\alpha-1} i'_\alpha i'_{\alpha+1} \cdots i'_{\beta-1} i'_{\beta-1} i'_{\beta+1} \cdots i'_m}
\end{aligned}
\tag{12.3.6}
$$

如果先进行收缩运算，即

$$
f^{(\alpha,\beta)}_{i_1 i_2 \cdots i_{\alpha-1} i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1} \cdots i_m} = \sum_{i\alpha} f_{i_1 i_2 \cdots i_{\alpha-1} i_\alpha i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_\alpha i_{\beta+1} \cdots i_m}
$$

然后再进行正交变换，即

$$
\begin{aligned}
&\hat{P}(A) f^{(\alpha,\beta)}_{i_1 i_2 \cdots i_{\alpha-1} i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1} \cdots i_m} \\
&= \sum_{i'_1 i'_2 \cdots i'_{\alpha-1} i'_{\alpha+1} \cdots i'_{\beta-1} i'_{\beta+1} \cdots i'_m} a_{i'_1 i_1} \cdots a_{i'_{\alpha-1} i'_{\alpha-1}} a_{i_{\alpha_1}' i_{\alpha_1}} \cdots a_{i'_{\beta-1} i_{\beta-1}} a_{i'_{\beta+1} i_{\beta+1}} \cdots a_{i'_m i_m} f^{(\alpha,\beta)}_{i'_1 \cdots i'_{\alpha-1} i'_{\alpha+1} \cdots i'_{\beta-1} i'_{\beta+1} \cdots i'_m}
\end{aligned}
\tag{12.3.7}
$$

可见(12.3.6)式与(12.3.7)式是完全一样的.

这就证明了正交变换 $\hat{P}(A)$ 与收缩运算是可以交换的.

3. $O(n)$ 群变换下的不可约张量与 $O(n)$ 群的不可约表示

张量空间 F 分解两个子空间 Σ 和 $F^{(0)}$，容易证明它们都是 $O(n)$ 群变换下的不变子空间.

由于收缩与 $\hat{P}(A)$ 交换，因而

$$
\hat{P}(A) f^{(0)}_{i_1 \cdots i_m} = f^{(0)'}_{i_1 \cdots i_m}, \quad \hat{P}(A) f^{(0)(\alpha,\beta)}_{i_1 \cdots i_m} = 0
$$

即 $\hat{P}(A)$ 作用于无迹张量的结果仍然是无迹张量，也就是说 $F^{(0)}$ 是 $O(n)$ 变换下的不变空间.

另一方面

$$
\begin{aligned}
&\hat{P}(A) \delta_{i_\alpha i_\beta} G^{(\alpha,\beta)}_{i_1 \cdots i_{\alpha-1} i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1} \cdots i_m} \\
&= \sum_{i'_1, i'_2, \cdots, i'_m} a_{i'_1 i_1} a_{i'_2 i_2} \cdots a_{i'_m i_m} \delta_{i_\alpha i_\beta} G^{(\alpha,\beta)}_{i'_1 \cdots i'_{\alpha-1} i'_{\alpha+1} \cdots i'_{\beta-1} i'_{\beta+1} \cdots i'_m} \\
&= \delta_{i_\alpha i_\beta} G^{(\alpha,\beta)'}_{i_1 i_2 \cdots i_{\alpha-1} i_{\alpha-1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1} \cdots i_m}
\end{aligned}
\tag{12.3.8}
$$

这说明子空间 $\Sigma(\varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_m})$ 也是 $O(n)$ 群的不变空间，但是下面将证明 Σ 中还包括更小的不变子空间，因而它不是荷载 $O(n)$ 群不可约表示的空间.

用 $\sum\limits_i \lambda_i = m$ 的 Young 图构成的标准 Young 算子 $Y^{[\lambda]}_{ii}$ 作用于 m 秩无迹张量空间 $F^{(0)}$. 得到具有 Young 图所描述的对称性的不可约张量

$$
Y^{[\lambda]}_{ii} f^{(0)}_{i_1 \cdots i_m} = f^{(0)}_{\begin{array}{|l|}\hline i_1 \cdots i\lambda_1 \\ \hline \cdots \\ \hline \cdots i_m \\ \hline \end{array}}
$$

因为 $O(n)$ 群是 $U(n)$ 群的子群，而无迹张量 $F^{(0)}$ 又是 $O(n)$ 群的不变子空间，因而具有特定置换对称性的无迹张量

$$f^{(0)}_{i_1\cdots i_m}=f^{0}_{\begin{array}{|l|}\hline i_1\cdots i\lambda_1\\ \hline \cdots \\ \hline \cdots i_m \\ \hline\end{array}}$$

为 $O(n)$ 群的不可约张量，它们荷载了 $O(n)$ 群的不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$（为了表示 $O(n)$ 群的不可约表示，用圆括号标记，以区别于 $U(n)$ 群的方括号 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$）.

与 $U(n)$ 群不同之处，在于并非所有 m 秩的 Young 图 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ 给出的 Young 算子，都能从无迹张量空间 $F^{(0)}$ 中投影出非零的张量，有很多 Young 算子，使

$$Y^{[\lambda]}_{ii}f^{(0)}_{i_1, i_2, \cdots, i_m}=0$$

因而只有

$$Y^{[\lambda]}_{ii}f^{(0)}_{i_1, i_2, \cdots, i_m}\neq 0$$

那样一些 Young 图 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m]$ 才能给出 $O(n)$ 群的不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$.

关于什么样 Young 图可给出 $O(n)$ 群的不可约表示，Weyl 证明了如下的定理（参见 Weyl 著"The Classical Groups"）.

定理 12.3.1 如果 Young 图 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ 为

$$\begin{array}{llll} i_1 & k_1 & \cdots\cdots\cdots & \lambda_1 \\ i_2 & k_2 & \cdots\cdots & \lambda_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & k_b & & \vdots \\ i_a & & & \lambda_n \end{array}$$

前两列的长度 $a+b>n$，则所投影出的无迹张量为零.

因而只有 $a+b\leqslant n$ 的 Young 图才能给出 $O(n)$ 群的不可约表示.

称可以给出非零不可约无迹张量的 Young 图为 $O(n)$ 群的允许 Young 图. 根据定理 12.3.1 允许 Young 图可分为两个类型，第一种类型允许 Young 图是第一列长度 $l_1\leqslant\frac{n}{2}$，因为 Young 图每列的长度 $l_1, l_2, \cdots, l_n$ 存在关系 $l_1\geqslant l_2\geqslant\cdots\geqslant l_n$，由此得到 $l_1+l_2\leqslant n$，因而 $l_1\leqslant\frac{n}{2}$ 一定是允许 Young 图，这类允许的 Young 图称为 T 型 Young 图；第二种允许 Young 图称 T′型 Young 图，它的第一列长度为 $l_1'=n-l_1$，其它各列长度为 $l_2'=l_2$，$l_3'=l_3'$，$\cdots$，$l_n'=l_n$. 由于 $l_2'=l_2<l_1$，因而 $l_1'+l_2'\leqslant n$，这种 T′型 Young 图也是允许 Young 图. 由于每个 T 型 Young 图对应地存在一个 T′型 Young 图，称 T′型 Young 图为相应的 T 型 Young 图的关联(associate) Young 图. 如：

λ_1, λ_2, $\vdots$, λ_{n-1}, λ_n $\quad$ $l_1\leqslant\frac{n}{2}$ $\quad$ $l_2\leqslant l_1\leqslant\frac{n}{2}$ $\quad$ $l_1+l_2\leqslant n$

$l_1\ l_2\ \cdots\cdots\ l_n$

T 型 Young 图

λ_1, λ_2, $\vdots$, λ_{n-1}, λ_n $\quad$ $l_1'=n-l_1\geqslant\frac{n}{2}$ $\quad$ $l_2\leqslant l_1\leqslant\frac{n}{2}$ $\quad$ $l_1'+l_2\leqslant n-l_1+l_2\leqslant n$

$l_1'\ l_2\ \cdots\cdots\ l_n$

T′型 Young 图

T′型 Young 图与相关联的 T 型 Young 图除第一列长度不同外，其它列长度 l_2，l_3，…，l_n 都一样，而 l_1 与 l'_1 间的关系为 $l'_n = n - l_1$.

对于 T 型 Young 图，$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ 中最多只能 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_\nu \geqslant 0$，而 $\lambda_{\nu+1} = \lambda_{\nu+2} = \cdots = \lambda_n = 0$. 对于偶数 n，$\nu = \frac{n}{2}$；对于奇数 n，$\nu = \frac{n-1}{2}$. 因而相应的不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ 为 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k, 0, 0, \cdots, 0)$，$k \leqslant \nu_1$，$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_k \neq 0$，0 的数目为 $\nu - k$. 与之对应的关联 Young 图为

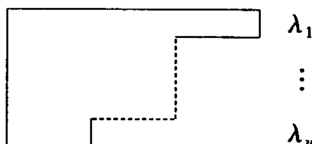
$$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k, 1, 1, 1, \cdots, 1) = (\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k, 0, \cdots, 0)_c$$

其中"1"的数目为 $(n-k)$. 因而 T 型 Young 图和 T′型 Young 图所描述的不可约表示分别记为

$$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$$

$$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu, 1, 1, \cdots, 1) = (\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)_c$$

可以证明 T 型 Young 图和与之相关联的 T′型 Young 图所描述的 $O(n)$ 群的不可约表示有相同的维数. 虽然维数相同，但对于 $O(n)$ 群这两种不可约表示是不等价的不可约表示. 特别是对 $n = 2\nu$ 的偶数阶的 $O(2\nu) = O(n)$ 群，第一列长度 $l_1 = \nu$ 的 T 型 Young 图与相关联的 T′型 Young 图完全一样，都为



称为自关联(self-ssociate) Young 图，但是它们所描述的不可约表示是不相同的.

$O(n)$ 群不可约表示用 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ 标记它们的不可约表示，与第九章和第十章已指出的 $O(n)$ 群的根空间也就是权空间维数 ν，本质上 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ 是相应不可约表示的最大权.

4. *$O(2\nu)$ 和 $O(2\nu+1)$ 群不可约表示的维数*

$O(n)$ $(n = 2\nu$ 或 $n = 2\nu + 1)$ 群不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ 的维数分别由下面的公式描述.

(1) $O(2\nu+1)$ 群不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ 的维数为

$$D_{(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)} = \prod_{i<j}^{\nu} (\lambda_i - \lambda_j - i + j)(\lambda_i + \lambda_j + 2\nu + 1 - i - j) \cdot \frac{\prod_{i}^{\nu} (2\lambda_i + 2\nu + 1 - 2i)}{(2\nu + 1 - 2)!(2\nu + 1 - 4)!} \tag{12.3.9}$$

(2) $O(2\nu)$ 群不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ 的维数为

$$D_{(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)} = 2^{\nu-1} 2^{(1-\delta_{\lambda_\nu, 0})} \prod_{i<j}^{\nu} \frac{(\lambda_i - \lambda_j - i + j)(\lambda_i + \lambda_j + 2\nu - i - j)}{(2\nu - 2)!(2\nu - 4)!\cdots 2!} \tag{12.3.10}$$

这些公式可用下节中给出的特征标进行计算. 在下面的表 12.3.1 至表 12.3.3 中分别给出了 $O(4)$，$O(5)$ 和 $O(7)$ 群部分不可约表示的维数.

表 12.3.1 $O(4)$群的部分不可约表示及维数

不可约表示$(\lambda_1\lambda_2)$	关联表示$(\lambda_1\lambda_2)$		$D_{(\lambda_1\lambda_2)}$
(00)	$(00)_0 \equiv (1111)$		1
(10)	$(10)_0 \equiv (1110)$		4
(20)	$(20)_0 \equiv (2110)$		9
(30)	$(30)_0 \equiv (3110)$		16
(11)	$(11)_0 \equiv (1100)$	自关联	6
(21)	$(21)_0 \equiv (2100)$	自关联	16
(31)	$(31)_0 \equiv (3100)$	自关联	30
(22)	$(22)_0 \equiv (2200)$	自关联	10

表 12.3.2 $O(5)$群不可约表示的维数

$(\lambda_1\lambda_2)$	$D_{(\lambda_1\lambda_2)}$	$(\lambda_1\lambda_2)$	$D_{(\lambda_1\lambda_2)}$
(00)	1	(22)	35
(10)	5	(41)	154
(20)	14	(32)	105
(11)	10	(42)	220
(30)	30	(33)	84
(21)	35	(43)	231
(40)	55	(44)	165
(31)	81		

表 12.3.3 $O(7)$群不可约表示的维数

$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$	$D_{(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)}$	$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$	$D_{(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)}$
(000)	1	(321)	1617
(100)	7	(222)	294
(200)	27	(430)	3003
(110)	21	(421)	4550
(300)	77	(331)	2079
(210)	105	(322)	1386
(111)	35	(440)	3003
(400)	182	(431)	7722
(310)	330	(422)	4095
(220)	168	(332)	2310
(211)	189	(441)	8008
(410)	819	(432)	9009
(320)	693	(333)	1386
(311)	616	(442)	10296
(221)	378	(433)	6006
(420)	1911	(443)	9009
(411)	1560	(444)	4179
(330)	825		

5. 子群 $SO(n)$ 的不可约表示

对于 $O(2\nu+1)$ 群，$O(2\nu+1)$ 群的不可约表示对子群 $SO(2\nu+1)$ 仍然是不可约表示，而且不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ 和 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)_c$（T 型 Young 图和与之关联的 T′型 Young 图所代表的不可约表示）是等价表示. 因而 $SO(2\nu+1)$ 群不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ 的维数也由(13.3.9)式描述.

$O(2\nu)$ 群，$\lambda_\nu=0$ 的不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{\nu-1}, 0)$ 和不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{\nu-1}, 0)$ 对子群 $SO(2\nu)$ 仍然是不可约表示，而且是相互等价的不可约表示.

但是 $O(2\nu)$ 群的不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ $(\lambda_\nu\neq 0)$ 对子群 $SO(2\nu)$ 是可约的，可约化为两个不可约表示的直和.

因而 $SO(2\nu)$ 群不可约表示的维数公式为

$$D_{\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu} = 2^{\nu-1}\prod_{i<j}^{\nu}\frac{(\lambda_i-\lambda_j-i+j)(\lambda_i+\lambda_j+2\nu-i-j)}{(2\nu-2)!(2\nu-4)!-2!} \tag{12.3.11}$$

(12.3.11)式与(10.3.18)式是等价的.

12.3.2　$U(n)$ 群不可约表示对 $SO(n)$ 群的分解

m 秩张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 通过置换群 S_m 的 Young 算子可构造出以 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ $\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i=m\right)$ 标记的不可约张量子空间，它们分别荷载了 $U(n)$ 群的不可约表示 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$.

而 m 秩张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 可分解为无迹张量子空间 $F^{(0)}$ 和由(12.3.3)式描述的张量 $\varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_m}$ 构成的子空间 Σ，即

$$V_n^{\otimes m}=F^{(0)}\oplus\Sigma$$

其中子空间 $F^{(0)}$ 由 S_m 群的 Young 算子构造成了 $SO(n)$ 群的 m 秩无迹不可约张量. 它们荷载了 $SO(n)$ 群的不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$.

而子空间 Σ 由(12.3.3)式表示的张量构成，这个子空间还可进一步分解为

$$\Sigma=F^{(1)}\oplus\Sigma' \tag{12.3.12}$$

其中 $F^{(1)}$ 为二次收缩运算下的无迹张量，即

$$\sum_{i_\alpha}f^{(1)}_{i_1\cdots i_\alpha\cdots i_\alpha\cdots i_m} \tag{12.3.13}$$

构成了 $(m-2)$ 秩的无迹张量子空间 $F^{(1)}$. 它们又构成 $(m-2)$ 秩的 $SO(n)$ 群的不可约张量 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ $\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i=m-2\right)$. 而子空间 Σ'，又可分解为 3 次收缩运算下的无迹张量子空间 $F^{(2)}$ 和剩余的子空间 Σ'，即

$$\Sigma'=F^{(2)}\oplus\Sigma''$$

$F^{(2)}$ 构成了 $SO(n)$ 群 $(m-4)$ 秩的不可约表示 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$ $\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i=m-4\right)$，$\Sigma''$ 还可分解为 $m-6$ 秩的无迹张量子空间，它们给出 $(m-6)$ 秩的无迹不可约张量表示. 如此连续分解，就可把张量空间 $V_n^{\otimes m}$ 完全分解为 $SO(n)$ 群的不可约表示空间，也就完成了

$U(n)$群不可约表示对$SO(n)$的分解.

下面以$U(5)$群几个不可约表示为例，说明它们对$SO(5)$群不可约表示的分解.

1° $U(5)$群的不可约表示[41]的分解

不可约表示[41]的维数为224，Young 图 对$SO(5)$群为T型允许 Young 图. 因而由5秩无迹张量可得到$SO(5)$群的不可约表示(41). 在5秩张量空间的子空间Σ中，经过一次收缩可得到3秩的无迹张量，由它们可得到3秩的不可约无迹张量，这些不可约张量为(30)和(21). 在剩余的张量空间Σ'中还可得到1秩的张量，由此得到不可约张量(10). 因而

$$\begin{array}{ccccccccc}[41] & = & (41) & \oplus & (30) & \oplus & (21) & \oplus & (10) \\ 224 & & 154 & & 30 & & 35 & & 5\end{array}$$

不可约表示下面的数字为它们的维数.

2° 不可约表示[411]的分解

$U(5)$群不可约表示[411]的维数为280维. Young 图 是T′型的允许的 Young 盘. 它的相关T型 Young 图为 ，因而可得到$SO(5)$群的不可约表示(41)，把6秩张量经一次收缩得到4秩的无迹张量，由它们可得到不可约表示(31)和(211)∽(21). 进一步收缩得到2秩无迹张量，给出不可约表(11). 因而

$$\begin{array}{ccccccccc}[41] & = & (41) & \oplus & (31) & \oplus & (21) & \oplus & (11) \\ 280 & & 154 & & 81 & & 35 & & 10\end{array}$$

这种分解的规则可概括如下：

(1) $U(n)$群的不可约表示$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$，如果是$SO(n)$群的T型允许 Young 图，则给出$SO(n)$群的不可约表示$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$，如果是T′型 Young 图，把它写为相应T型 Young 图的不可约表示$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$，$\lambda_1' = n - \lambda_1$，它与$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\nu)$等价.

(2) 对 Young 图$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$去掉两个方块(即进行一次收缩)，得到$SO(n)$群的$(m-2)$秩无迹张量的不可约表示$(\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_\nu)$($\sum_{i=1}^{\nu}\mu_i = m-2$). 去掉两方块的规则为：

(i) 在一行的右侧，去掉两个方块；

(ii) 在一行右侧和一列的最下边各去掉一个方块(不能在同一列中去掉两个方块)，去掉两个方块后必须保证剩余部分仍然是 Young 图. 所得到的$SO(n)$群的$(m-2)$秩 Young 图，必须满足条件

$$[\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_\nu] \otimes [2_\perp] \text{包括} [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$$

(3) 如此进行下去，当m为奇数时，一直收缩到1秩张量，亦即向量，给出$SO(n)$群的n维的不可约表示$(1, 0, 0, \cdots, 0)$；当m为偶数时，一直收缩到一个标量，给出1维不可约$(0, 0, 0, \cdots, 0)$.

下面给出部分 $U(5)$ 群不可约表示向 $SO(5)$ 群和 $U(7)$ 群部分不可约表示向 $SO(7)$ 群分解的分解表.

表 13.3.4　$U(5)$ 群不可约表示向 $SO(5)$ 不可约表示分解

秩	$U(5)$ $[\lambda]$	$SO(5)$ $(\lambda_1\lambda_2)$										$D[\lambda]$
0	[0]	(00)										1
1	[1]	(10)										5
2	[2]	(20)	(00)									15
	[11]	(11)										10
3	[3]	(30)	(10)									35
	[21]	(21)	(10)									40
4	[43]	(40)	(20)	(00)								70
	[31]	(31)	(20)	(11)								105
	[22]	(22)	(20)	(00)								50
	[221]	(21)	(11)									45
5	[41]	(41)	(21)	(30)	(10)							224
	[32]	(32)	(30)	(21)	(10)							175
	[311]	(31)	(21)	(10)								126
	[211]	(22)	(21)	(10)								75
	[2111]	(20)	(11)									24
6	[42]	(42)	(40)	(31)	(22)	$(20)^2$	(00)					420
	[441]	(41)	(31)	(21)	(11)							280
	[33]	(33)	(31)	(11)								175
	[321]	(32)	(31)	(22)	(21)	(20)	(11)					280
	[3111]	(30)	(21)	(10)								70
7	[43]	(43)	(41)	(32)	(30)	(21)	(10)					560
	[421]	(42)	(41)	(32)	(31)	(22)	(30)	$(21)^2$	(10)			700
	[331]	(33)	(32)	(31)	(21)	(11)						315
	[4111]	(40)	(31)	(20)	(11)							160
	[322]	(32)	(30)	(22)	(21)	(10)						210
	[3211]	(31)	(22)	(21)	(20)	(11)						175
8	[44]	(44)	(42)	(40)	(22)	(20)	(00)					490
	[431]	(43)	(42)	(33)	(41)	(32)	$(31)^2$	(22)	(21)	(20)	(11)	1050
	[422]	(42)	(32)	(40)	(31)	$(22)^2$	$(20)^2$	(00)				560
	[4211]	(41)	(32)	(31)	(30)	$(21)^2$	(11)					450
9	[441]	(31)	(44)	(43)	(42)	(41)	(32)	(22)	(30)	(21)	(10)	980
	[432]	(43)	(42)	(41)	(33)	$(32)^2$	(31)	(30)	(22)	$(21)^2$	(10)	1120
	[4311]	(42)	(40)	(33)	(32)	$(31)^2$	(22)	(21)	(20)	(11)		720
	[4221]	(41)	(32)	(31)	(22)	(30)	$(21)^2$	(10)				480
10	[442]	(44)	(43)	$(42)^2$	(32)	(40)	(31)	$(22)^2$	$(20)^2$	(00)		1176
	[4411]	(43)	(33)	(41)	(32)	(31)	(21)	(11)				700
	[4321]	(42)	(41)	(33)	$(32)^2$	$(31)^2$	(30)	$(22)^2$	$(21)^2$	(20)	(11)	1024
	[4222]	(40)	(31)	(22)	$(20)^2$	(00)						200

表 13.3.5 U(7)群不可约表示的分解

秩	U(7) [λ]	SO(7) ($\lambda_1\lambda_2\lambda_3$)						D[λ]
0	[0]	(000)						1
1	[1]	(100)						7
2	[2]	(000)	(200)					28
	[11]	(110)						21
3	[3]	(100)	(300)					84
	[21]	(100)	(210)					112
	[111]	(111)						35
4	[4]	(000)	(200)	(400)				210
	[31]	(110)	(200)	(310)				378
	[22]	(000)	(200)	(220)				196
	[221]	(110)	(211)					210
5	[41]	(100)	(210)	(300)	(410)			1008
	[32]	(100)	(210)	(300)	(320)			882
	[311]	(111)	(210)	(311)				756
	[221]	(100)	(210)	(221)				490
	[2111]	(111)	(211)					224
6	[42]	(000)	$(200)^2$	(220)	(310)	(400)	(420)	2646
	[411]	(110)	(211)	(310)	(411)			2100
	[33]	(110)	(310)	(330)				1176
	[321]	(110)	(200)	(211)	(220)	(310)	(321)	2352
	[222]	(000)	(200)	(220)	(222)			490
	[3111]	(111)	(211)	(311)				840
	[2211]	(110)	(211)	(221)				588
	[21111]	(111)	(210)					140

12.4 SO(n)群的不可约表示 Lie 代数法

12.4.1 SO(n)群不可约表示的最高权

由定理 10.2.5 得到标记不可约表示的最高权满足条件

$$\lambda_i = \frac{2(\Lambda\alpha_i)}{(\alpha_i,\ \alpha_i)},\quad 为非负整数$$

α_i 为 Lie 代数 SO(n)的素根.

1. SO(2m+1)群

Lie 代数 SO(2m+1)的素根为 $\alpha_i = e_i - e_{i+1}$, $i=1, 2, \cdots, \alpha-1$, $\alpha_{\nu n} = e_{\nu n}$, 因而$(\alpha_i, \alpha_i)=2$, $i=1, 2, \cdots, \nu-1$, $(\alpha_\nu, \alpha_\nu)=1$. 因而在$(e_1, e_2, \cdots, e_\nu)$为基矢的坐标系中

$$\lambda_i = \frac{2(\Lambda\alpha_i)}{(\alpha_i,\ \alpha_i)} = \Lambda_i - \Lambda_{i+1},\quad i = 1, 2, \cdots, \nu - 1$$

$$\lambda_m = \frac{2(\Lambda\alpha_m)}{(\alpha_m,\ \alpha_m)} = 2\Lambda_m \tag{12.4.1}$$

$\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_m$ 为最高权 Λ 在基矢$(e_1, e_2, \cdots, e_m)$中的分量, 由于 $\lambda_i(i=1, 2, \cdots, m)$

为非负整数，因而

$$\Lambda_1 \geqslant \Lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \Lambda_{m-1} \geqslant \Lambda_m \geqslant 0$$

当 $\Lambda_i\ i=1, 2, \cdots, m$ 为整数时，$[\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_m]$ 构成 Young 图，即 $SO(2m+1)$ 群的张量不可约表示. $(\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_m)$ 也可为半整数，它们为 $SO(2m+1)$ 群旋量不可约表示.

Lie 代数 $so(2m+1)$ 是典型 Lie 代数 B_m 的紧致实形. 它有两个基本表示，一个是 λ_1，$\lambda_2=\lambda_3=\cdots=\lambda_m=0$，对于这个表示 $\Lambda_1=1$，$\Lambda_2=\Lambda_3=\cdots=\Lambda_m=0$. 相应 Young 图为□，即 m 维向量空间构成的 $SO(2m+1)$ 群的不可约表示. 由它的 m 次直积构成 m 秩张量，可给出 $\sum_{i=1}^{m}\Lambda_i=m$ 的 $(\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_m)$ 的不可约张量表示. 而另一个基本表示为 $\lambda_m=1$，$\lambda_1=\lambda_2=\cdots=\lambda_{n-1}=0$. 它们相当于 $\Lambda_1=\frac{1}{2}$，$\Lambda_2=\frac{1}{2}$，$\cdots$，$\Lambda_m=\frac{1}{2}$，即 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \cdots, \frac{1}{2})$ 为旋表示. 它的基矢为 $SO(2m+1)$ 的基本旋量，维数为 2^{2m+1}，由它的直积可得到各种旋量不可约表示. 这种不可约表示是不能由 12.3 节中的不可约张量得到的.

2. *SO*(2*m*) 群

Lie 代数 $so(2m)$ 的素根为 e_i-e_{i+1}，$i=1, 2, \cdots, m$，$e_m=e_{m-1}+e_n$，因而

$$\lambda_i=\frac{2(\Lambda\alpha_i)}{(\alpha_i, \alpha_i)}=\Lambda_i-\Lambda_{i+1}, \quad i=1, 2, \cdots, m-1$$

$$\lambda_m=\frac{2(\Lambda\alpha_m)}{(\alpha_m, \alpha_m)}=\Lambda_{n-1}+\Lambda_m \tag{12.4.2}$$

由此得到 $\Lambda_1 \geqslant \Lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \Lambda_{m-1} \geqslant |\Lambda_m| \geqslant 0$，而且

$$\Lambda_1=(2\lambda_1+2\lambda_2+\cdots+2\lambda_{m-2}+\lambda_{m-1}+\lambda_m)/2$$
$$\Lambda_2=(2\lambda_2+2\lambda_3+\cdots+2\lambda_{m-2}+\lambda_{m-1}+\lambda_m)/2$$
$$\cdots\cdots$$
$$\Lambda_{m-1}=(\lambda_{m-1}+\lambda_m)/2$$
$$\Lambda_m=(-\lambda_{m-1}+\lambda_m)/2$$

可见 Λ_m 可正可负，当 $\lambda_{m-1}+\lambda_m$ 为偶数时，$\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_m$ 均为正整数，得到 $SO(2m)$ 群的不可约张量表示，而当 $\lambda_{m-1}+\lambda_m$ 为奇数，$\Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_m$ 均为半整数，它们给出 $SO(2m)$ 群的旋表示.

Lie 代数 $so(2m)$ 是典型 Lie 代数 D_m 的紧致实形. 它有三个基本表示，第一个是 $\lambda_1=1$，$\lambda_i=0$，$i=2, 3, \cdots, m$. 此时 $\Lambda_1=1$，$\Lambda_2=\Lambda_3=\cdots=\Lambda_m=0$，即 Young 图为□的 m 维向量空间给出的不可约表示. 它的 k 次直积给出 k 次不可约张量表示. 第二个基本表示是 $\lambda_m=1$，$\lambda_i=0\ i\neq m$，对应的 $\Lambda_k=\frac{1}{2}$，即 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \cdots, \frac{1}{2}\right)$，它为旋量表示. 第三个基本表示为 $\lambda_{m-1}=1$，$\lambda_i=0$，$i\pm m-1$. 此时 $\Lambda_k=\frac{1}{2}$，$k=1, 2, \cdots, m-1$，$\Lambda_m=-\frac{1}{2}$，即 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\cdots\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$，这也是旋量表示. 由 $\left(\frac{1}{2}\cdots\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\right)$ 的直积可得到 $SO(2m)$ 群的全部

旋量表示. $\left(\frac{1}{2}\cdots\frac{1}{2}\right)$和$\left(\frac{1}{2}\cdots-\frac{1}{2}\right)$表示维数均为$2^{2m}$.

因而群链

$$SO(4\lambda+1)\supset SO(4\lambda)$$

的不可约表示分解为

$$\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\cdots\frac{1}{2}\right)\to\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\cdots\frac{1}{2}\right)\oplus\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\cdots-\frac{1}{2}\right)$$

这个结果在9.10节中已经提到了.

12.4.2 $SO(n)$群不可约表张量表示的最高权

1. $SO(2m+1)$群

$SO(2m+1)$群的Lie代数为$so(2m+1)$，它由$(2m+1)\times(2m+1)$的反对称矩阵构成，反对称矩阵的对角元为零，因而(9.8.14)式给出的Lie代数$so(2m+1)$的基矢均为对角元为零的矩阵，用它们来寻求不可约张量的权是不方便的. 因而为了计算不可约表示的权需要对Lie代数$so(2m+1)$的基矢进行如下变换.

$2m+1$维的实空间，选正交归一化的基矢$\{f_1, f_2, \cdots, f_{2m+1}\}$，矢量$V$和$U$可表示为

$$V=\sum_i v_i f_i,\quad U=\sum_i u_i f_i$$

于是内积

$$(VU)=\sum_i v_i u_i$$

$(2m+1)\times(2m+1)$的正交矩阵$A(\tilde{A}=A^{-1})$，保持这种二次形不变，即

$$(AV, AU)=(V, U)$$

现在引入一组新的基矢

$$\left.\begin{aligned}e_j&=\frac{1}{\sqrt{2}}(f_j+if_{m+j})\\ e_j'&=\frac{1}{\sqrt{2}}(f_j-if_{m+j})\end{aligned}\right\},\quad 1\leqslant j\leqslant m \tag{12.4.2}$$

在这样一组$(2m+1)$个基矢下，矢量U和V为

$$V=u_0e_0+\sum_{j=1}^{m}(v_je_j+v_j'e_j'),\quad U=u_0e_0+\sum_{j=1}^{m}(u_je_j+u_j'e_j')$$

在这组基矢下正交矩阵变为A'，仍然保持内积不变，即

$$(AV, AU)=v_0u_0+\sum_{j=1}^{m}(v_ju_j'+v_j'u_j) \tag{12.4.3}$$

此时正交矩阵A'满足

$$\tilde{A}'KA'=K,\quad K=\begin{pmatrix}1&0&\cdots&0\\0&0&\cdots&E_m\\\vdots&\vdots&&\vdots\\0&E_m&\cdots&0\end{pmatrix}$$

因而在新的基矢下 Lie 代数 $O(2m+1)$ 满足方程

$$\tilde{\mathscr{A}}K\mathscr{A}=K\Rightarrow\tilde{\mathscr{A}}K=K\mathscr{A}^{-1}=-K\mathscr{A} \tag{12.4.4}$$

$\mathscr{A}$ 为反对称矩阵，$\tilde{\mathscr{A}}=-\mathscr{A}$，满足这个条件的反对称矩阵具有形式

$$\mathscr{A}=\begin{pmatrix}0 & -\tilde{a}_1 & -\tilde{a}_2\\ a_1 & \mathscr{A}_1 & \mathscr{A}_2\\ a_2 & \mathscr{A}_3 & \mathscr{A}_4\end{pmatrix}$$

其中 a_1，a_2 为 $m\times1$ 的矩阵，$\mathscr{A}_1$，$\mathscr{A}_2$，$\mathscr{A}_3$，$\mathscr{A}_4$ 为 $m\times m$ 的矩阵，满足条件

$$\tilde{\mathscr{A}}_1=-\mathscr{A}_4,\quad \tilde{\mathscr{A}}_2=-\mathscr{A}_2,\quad \tilde{\mathscr{A}}_3=-\mathscr{A}_3 \tag{12.4.6}$$

对于(12.4.5)式所描述的矩阵 $\mathscr{A}$，可选取如下的基矢：

$$\begin{cases}E_{jk}-E_{k+m,\,j+v}, & j\neq k=1,2,\cdots,m\\ E_{j+m,\,k}-E_{k+m,\,j} & \\ E_{j,\,k+m}-E_{k,\,j+m} & \\ E_{k0}-E_{0,\,k+m}, & j<k=1,2,\cdots,m\\ E_{0k}-E_{k+m,\,0} & \\ H_j=E_{ij}-E_{j+m,\,j+m}, & j<k=1,2,\cdots,\nu\end{cases} \tag{12.4.7}$$

这些基矢共 $m(2m+1)$ 个. 令

$$H=\sum_{j=1}^{m}e_jH_j \tag{12.4.8}$$

则(12.4.7)式交换关系为

$$\begin{aligned}[H,\,E_{jk}-E_{k+m,\,j+m}]&=(e_j-e_k)(E_{jk}-E_{k+m,\,j+m})\\ [H,\,E_{j+m,\,k}-E_{k+m,\,j}]&=(-e_j-e_k)(E_{j+m,\,k,\,k}-E_{k+m,\,j+m})\\ [H,\,E_{j,\,k+m}-E_{k,\,j+m}]&=(e_j+e_k)(E_{j,\,k+m}-E_{k,\,j+m})\\ [H,\,E_{k0}-E_{0k+m}]&=e_k(E_{k0}-E_{0k+m})\\ [H,\,E_{0k}-E_{k+m,\,0}]&=-e_k(E_{0k}-E_{k+m,\,0})\end{aligned} \tag{12.4.9}$$

利用交换关系

$$[E_{ij},\,E_{kl}]=\delta_{jk}E_{il}-\delta_{il}E_{kj}$$

可得到(12.4.7)式中其它基矢间的交换关系，从而可证明(12.4.7)式给出的 Lie 代数 $so(m+1)$ 的基矢是 C-W 基，而且

$$\begin{aligned}E_{e_j-e_k}&=E_{jk}-E_{k+m,\,j+m}\\ E_{-e_j+e_k}&=E_{kj}-E_{j+m,\,k+m}\\ E_{e_j+e_l}&=E_{j,\,k+m}-E_{k,\,j+m}\\ E_{-(e_j+e_l)}&=E_{j+m,\,k}-E_{k+m,\,j}\\ E_{e_j+e_l}&=E_{j,\,k+m}-E_{k,\,j+m}\\ E_{e_k}&=E_{k0}-E_{0k+m}\end{aligned}$$

$$E_{-e_k} = E_{0k} - E_{k+m,0} \tag{12.4.10}$$

的根分别为 $\pm e_j \pm e_k$，$\pm e_k$，$1 \leqslant j, k \leqslant m$，这正是典型 Lie 代数 B_m 的根系 Σ.

利用 Cartan 子代数 $H = \sum_{i=1}^{m} e_i H_i$，可通过与 12.2 节相同的方法，证明无迹不可约张量$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m)$的最大权为

$$\Lambda = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i e_i \tag{12.4.11}$$

2. $SO(2m)$群

$SO(2m)$群的 Lie 代数 $so(2m)$是典型 Lie 代数 D_m 的紧致实形，在 $2m$ 维向量空间中选取(12.4.2)式中的基矢

$$e_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(f_j + if_{m+j}), \quad e_j' = \frac{1}{\sqrt{2}}(f_j - if_{m-j}) \tag{12.4.2'}$$

则 Lie 代数 $so(2m)$的元素为

$$\mathscr{A} = \begin{pmatrix} \mathscr{A}_1 & \mathscr{A}_2 \\ \mathscr{A}_3 & \mathscr{A}_4 \end{pmatrix}$$

其中 $\mathscr{A}_i$，$i=1,2,3,4$ 为 $m \times m$ 矩阵，它们满足条件(12.4.6)，因而 Lie 代数 $so(2m)$在这组基矢下的 C-W 基为

$$E_{jk} - E_{k+m,j+m}, \quad E_{j+m,k} - E_{k+m,j}, \quad E_{j,k+m} - E_{k,j+m}$$

Cartan 子代数为

$$H = \sum_{i=1}^{m} e_i H_i = \sum_{i=1}^{m} e_i (E_{jj} - E_{j+m,j+m})$$

它们同样满足交换关系(12.4.9)(只取去掉了 $E_{0k} - E_{k+m,0}$和 $E_{k,0} - E_{0,k+m}$).

利用 H 同样可证明不可约张量$(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m)$表示的最高权为

$$\Lambda = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i e_i \tag{12.4.11'}$$

12.4.3 $SO(n)$群的特征标

1. $SO(n)$群的共轭类

对于 $SO(2m+1)$群，可以证明$(2m+1) \times (2m+1)$的矩阵 $A \in SO(2m+1)$，总存在一个$(2m+1) \times (2m+1)$的矩阵 $U \in SO(2m+1)$，使 A 对角化，即

$$U^{-1}AU = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & 0 \\ & \varepsilon_1 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & \varepsilon_m & & & \\ & & & & \varepsilon_1^* & & \\ & & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & & \varepsilon_m^* \end{pmatrix}, \quad |\varepsilon_i| = 1 \tag{12.4.12}$$

对于 $SO(2m)$群，则为

$$U^{-1}AU=\begin{pmatrix}\varepsilon & & & & & 0\\ & \ddots & & & & \\ & & \varepsilon_m & & & \\ & & & \varepsilon_1^* & & \\ & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & \varepsilon_m^*\end{pmatrix},\quad |\varepsilon_i|=1 \tag{12.4.13}$$

$AU\in SO(2m)$. 因而 $SO(n)$ 群的共轭类由 m 个模为 1 的复数描述.

2. $SO(n)$ 群的特征标

经过与 $U(n)$ 群特征标相类似的计算，可得到 $SO(n)$ 群的特征标.

(1) $SO(2m+1)$ 群的特征标

$$X^{(\lambda)}(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_m)=\frac{|\varepsilon^{h_1}-\varepsilon^{-h_1},\cdots,\varepsilon^{h_m}-\varepsilon^{-h_m}|}{|\varepsilon^{l_1}-\varepsilon^{-l_1},\cdots,\varepsilon^{l_m}-\varepsilon^{-l_m}|} \tag{12.4.14}$$

其中 $h_j=\lambda_j+m-j+\dfrac{1}{2}$, $l_j=m-j+\dfrac{1}{2}$(不可约表示 $(\lambda)=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m)$).

$$|\varepsilon^{h_1}-\varepsilon^{-h_1},\cdots,\varepsilon^{h_m}-\varepsilon^{-h_m}|=\det\begin{pmatrix}\varepsilon_1^{h_1}-\varepsilon_1^{-h_1} & \varepsilon_1^{h_2}-\varepsilon_1^{-h_2} & \cdots & \varepsilon_1^{h_m}-\varepsilon_1^{-h_m}\\ \varepsilon_2^{h_1}-\varepsilon_2^{-h_1} & \varepsilon_2^{h_2}-\varepsilon_2^{-h_2} & \cdots & \varepsilon_2^{h_m}-\varepsilon_2^{-h_m}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \varepsilon_m^{h_1}-\varepsilon_m^{-h_1} & \varepsilon_m^{h_1}-\varepsilon_m^{-h_1} & \cdots & \varepsilon_m^{h_m}-\varepsilon_m^{-h_m}\end{pmatrix} \tag{12.4.15}$$

(2) $SO(2m)$ 群的特征标

$$X^{(\lambda)}(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_m)=\frac{|\varepsilon_1^{h_1}+\varepsilon_1^{-h_1},\cdots,\varepsilon_1^{h_m}+\varepsilon_1^{-h_m}|+|\varepsilon_1^{h_1}-\varepsilon_1^{-h_1},\cdots,\varepsilon_1^{h_m}-\varepsilon_1^{-h_m}|}{|\varepsilon^{l_1}+\varepsilon^{-l_1},\cdots,\varepsilon^{l_m}-\varepsilon^{-l_m}|} \tag{12.4.16}$$

其中 $h_j=\lambda_j+m-j$, $l_j=m-j$.

(3) $SO(2m+1)$ 群的特例 $SO(3)$ 群的特征标. 对于 $SO(3)$ 群 $m=1$, $\varepsilon_1=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$, 不可约表示为 (j), 由 (12.4.15) 式得到

$$|\varepsilon^{h_1}|=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(j+1-1+\frac{1}{2})}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(j+1-1+\frac{1}{2})}=2\mathrm{i}\sin(j+\frac{1}{2})\varphi$$

$$|\varepsilon^{l_1}|=2\mathrm{i}\sin\frac{1}{2}\varphi$$

因而特征标为

$$X^{(j)}(\varphi)=\frac{\sin(j+\frac{1}{2})\varphi}{\sin\frac{1}{2}\varphi}$$

这一结果在第十一章中已得到了.

12.5 $Sp(2m)$群的不可约表示

12.5.1 $Sp(2m)$群的不可约表示与不可约张量方法

1. $Sp(2m)$群与斜二次形

1° $Sp(2m)$群

在 9.8 节中已指出典型 Lie 代数 C_m 与辛代数 $sp(2m,\mathbf{C})$同构，$sp(2m,\mathbf{C})$的元素为 $2m\times 2m$ 的反辛矩阵，即 $\mathscr{A}\in sp(2m,\mathbf{C})$，则

$$\tilde{\mathscr{A}}J=-J\mathscr{A},\quad \tilde{J}=-J \tag{12.5.1}$$

$Sp(2m)$群为 $\mathscr{A}$ 的指数映射，即 $A=\mathrm{e}^{\mathscr{A}}$，$A\in Sp(2m)$，由此容易证明 $A\in Sp(2m)$满足条件

$$\tilde{A}JA=J \tag{12.5.2}$$

称满足条件(12.5.2)式的矩阵为辛矩阵，即 $Sp(2m)$群由全部辛矩阵构成.

容易证明矩阵 A 满足条件(12.5.2)，因为

$$\tilde{A}=\mathrm{e}^{\tilde{\mathscr{A}}},\quad A^{-1}=\mathrm{e}^{-\mathscr{A}}$$

于是

$$\tilde{A}J=\mathrm{e}^{\tilde{\mathscr{A}}}J=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\tilde{\mathscr{A}}^nJ=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}J(-1)^n\mathscr{A}^n=J\mathrm{e}^{-\mathscr{A}}=JA^{-1}$$

由(12.5.2)式可得到

$$\det(\tilde{A}JA)=(\det A)^2\det J=\det J$$

因而

$$(\det A)^2=1,\quad \det A=\pm 1 \tag{12.5.3}$$

即辛矩阵的行列式为 ± 1.

由于 $\tilde{J}=-J$，因此

$$\det\tilde{J}=\det J=(-1)^n\det J$$

因此只有 $n=2m$(偶数)，$\det J\neq 0$. 这表明辛群只能定义在 $n=2m$ 的空间上.

所以在 9.8 节中取 J 为

$$J=\begin{pmatrix}0 & E_n\\ -E_n & 0\end{pmatrix},\quad J_{ij}=\varepsilon_{ij}=\begin{cases}1, & 1\leqslant i\leqslant m,\ m<j\leqslant 2m\\ -1, & m<i\leqslant 2m,\ 1\leqslant j\leqslant m\\ 0, & \text{其它}\end{cases} \tag{12.5.4}$$

然而 J 也可取另外两种形式，即

$$J=\begin{pmatrix}0 & 1 & & & & & \\ -1 & 0 & & & & & \\ & & 0 & 1 & & & \\ & & -1 & 0 & & & \\ & & & & \ddots & & \\ & & & & & 0 & 1\\ & & & & & -1 & 0\end{pmatrix}$$

或

$$J = \begin{pmatrix} & & & & & & & & 1 \\ & & & & & & & 1 & \\ & & & & & & 1 & & \\ & & & & & \iddots & & & \\ & & & & 1 & & & & \\ & & & -1 & & & & & \\ & & -1 & & & & & & \\ & -1 & & & & & & & \\ \iddots & & & & & & & & \\ -1 & & & & & & & & \end{pmatrix}$$

这三种形式是等价的. 我们只讨论(12.5.4)式定义的 J 矩阵.

通常把 $2m$ 个坐标编号为 $1, 2, \cdots, m, 1', 2', \cdots, m'$. 此时 J 的矩阵元 $j_{ik} = \varepsilon_{ik}$ 为

$$\varepsilon_{ik} = \begin{cases} 1, & k = i', \quad i = 1, 2, \cdots, m \\ -1, & i = k', \quad k = 1, 2, \cdots, m \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \tag{12.5.5}$$

2° 斜积与斜二次形

在 $n = 2m$ 维的 Euclid 空间 $\mathbf{R}^n$ 中选择一组基矢 $e_1, e_2, \cdots, e_m, e_1', e_2', \cdots, e_m'$, 于是 $\mathbf{R}^n$ 空间中任意矢量 X 可表示为

$$X = \sum_{i=1}^{m} (x_i e_i + x_i' e_i') = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \\ x_1' \\ x_2' \\ \vdots \\ x_m' \end{pmatrix}.$$

以矩阵 J 为度规张量可定义矢量 X 和 Y 的斜积(skew pruduct), 即

$$\{X, Y\} = \tilde{X} J Y = (x_1, x_2, \cdots, x_m, x_1', \cdots, x_m') J \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \\ y_1' \\ \vdots \\ y_m' \end{pmatrix}$$

$$= \sum_i (x_i y_i' - x_i' y_i) \tag{12.5.6}$$

显然在 $Sp(2m)$ 群的矩阵 A 作用下，(12.5.6)式定义的斜积不变，即

$$\begin{aligned}\{AX, AY\} &= \widetilde{AX}JAY \\ &= \tilde{X}\tilde{A}JAY \\ &= \tilde{X}JY \end{aligned} \tag{12.5.7}$$

(12.5.6)式定义的斜积也称斜二次形，因而 $Sp(2m)$ 群实际上是保持 $2m$ 维空间中斜二次形不变的所有线性变换构成的群.

3° $Sp(2m)$ 群的矩阵为单模矩阵

前面已得到 $A \in Sp(2m)$，则 $\det A = \pm 1$. 但是可进一步证明构成 $Sp(2m)$ 的矩阵还要求 $\det A = 1$.

在空间 $\mathbf{R}^n$ 中取 n 个矢量 $X^{(1)}, X^{(2)}, \cdots, X^{(n)}$，由它们的分量构成的行列式记为

$$(X^{(1)}, X^{(2)}, \cdots, X^{(n)}) = \det\begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & \cdots & x_1^{(h)} \\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & \cdots & x_2^{(h)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{m'}^{(1)} & x_{m'}^{(2)} & \cdots & x_{m'}^{(h)} \end{pmatrix}$$

可以证明

$$\begin{aligned}&(X^{(1)}, X^{(2)}, \cdots, X^{(n)}) \\ &= \frac{1}{2^m m!}\sum_p (-1)^p \{X^{(1)}, X^{(2)}\}\{X^{(3)}, X^{(4)}\}\cdots\{X^{(n-1)}, X^n\}\end{aligned} \tag{12.5.8}$$

其中 p 表示对矢量 $X^{(1)}, X^{(2)}, \cdots, X^{(n)}$ 的任意置换，$(-1)^p$ 为置换 p 的宇称. 此式的证明见 Hamermesh 的著作.

由于前面已证明在 $Sp(2m)$ 群的变换下斜积保持不变，因而当取 $A \in Sp(2m)$ 时，

$$AX = X'$$

则变换后的(12.5.7)式为

$$\begin{aligned}&(X^{(1)'}, X^{(2)'}, \cdots, X^{(n)'}) \\ &= \frac{1}{m!2^m}\sum_p (-1)^p \{X^{(1)'}, X^{(2)'}\cdots X^{(n-1)'}, X^{n'}\} \\ &= \frac{1}{m!}\frac{1}{2^m}\sum_p (-1)^p \{X^{(1)}, X^{(2)}\cdots X^{(n-1)}, X^{n}\}\end{aligned}$$

因而要求

$$(X^{(1)'}, X^{(2)'}, \cdots, X^{(n)'}) = (X^{(1)}, X^{(2)}, \cdots, X^{(n)})$$

但是按定义可计算出

$$[X^{(1)'}, X^{(2)'}, \cdots, X^{(n)'}] = \det A[X^{(1)}, X^{(2)}, \cdots, X^{(n)}]$$

因而为了使(12.5.8)式具有 $Sp(2m)$ 群的不变性，还要求 $Sp(2m)$ 群的矩阵 A 是单模矩阵.

2. 张量的辛收缩以及辛收缩与辛变换的可交换性

可用(12.5.5)式给出的 ε_{ik} 定义 k 秩张量的广义收缩运算，称为辛收缩. 它的定义为

$$f^{(i_\alpha i_\beta)}_{i_1\cdots i_{\alpha-1}i_{\alpha+1}\cdots i_{\beta-1}i_{\beta+1}\cdots i_k} = \sum_{i_\alpha i_\beta}\varepsilon_{i_\alpha i_\beta} f_{i_1 i_2\cdots i_\alpha\cdots i_\beta\cdots i_k} \tag{12.5.9}$$

这种收缩同样把 k 秩张量收缩为 $k-2$ 秩的张量，对每个张量这种收缩都有$\frac{k(k-1)}{2}$个，称收缩后为零的张量为无迹张量，全部无迹张量构成一个子空间，称为无迹子空间，记为 $F^{(0)}$，可以证明 k 秩张量空间可分解为

$$F^{(k)} = F^{(0)} \oplus \Sigma$$

与 12.1 节中相似 Σ 中的张量 $\varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_k}$ 具有形式

$$\varphi_{i_1, i_2, \cdots, i_k} = \varepsilon_{i_1 i_2} G^{(12)}_{i_3 \cdots i_k} + \cdots + \varepsilon_{i_\alpha i_\beta} G^{(\alpha\beta)}_{i_1 \cdots i_{\alpha-1} i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1} \cdots i_k} + \cdots$$

其中共$\frac{k(k-1)}{2}$项.

用 $Sp(2m)$ 群元素 A 作用于张量 $f_{i_1, i_2, \cdots, i_k}$，得到

$$\hat{P}(A) f_{i_1, i_2, \cdots, i_k} = \sum_{j_1, j_2, \cdots, j_k} a_{i_1 j_1} a_{i_2 j_2} \cdots a_{i_k j_k} f_{j_1, j_2, \cdots, j_k} = f'_{i_1, i_2, \cdots, i_k} \tag{12.5.10}$$

对(12.5.10)式进行收缩运算，得到

$$\begin{aligned} & f'^{(i_\alpha i_\beta)}_{i_1 \cdots i_{\alpha-1} i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1} \cdots i_k} \\ &= \sum_{i_\alpha i_\beta} \varepsilon_{i_\alpha i_\beta} \sum_{j_1, j_2, \cdots, j_k} a_{i_1 j_1} a_{i_2 j_2} \cdots a_{i_\alpha j_\alpha} \cdots a_{i_\beta j_\beta} \cdots a_{i_k j_k} f_{j_1, j_2, \cdots, j_k \cdots j_\beta \cdots j_k} \end{aligned}$$

由于

$$\sum_{i_\alpha i_\beta} \varepsilon_{i_\alpha i_\beta} a_{i_\alpha j_\alpha} a_{i_\beta j_\beta} = \varepsilon_{j_\alpha j_\beta}$$

于是得到

$$\begin{aligned} & f'^{(i_\alpha i_\beta)}_{i_1 \cdots i_{\alpha-1} i_{\alpha+1} \cdots i_{\beta-1} i_{\beta+1} \cdots i_k} \\ &= \sum_{j_1 j_2 \cdots j_\alpha \cdots j_\beta \cdots j_k} a_{i_1 j_1} \cdots a_{i_{\alpha-1} j_{\alpha-1}} a_{i_{\alpha+1} j_{\alpha+1}} \cdots a_{i_{\beta-1} j_{\beta-1}} a_{j_{\beta+1} j_{\beta+1}} \cdots a_{i_k j_k} f_{j_1, j_2, \cdots, j_k} \\ &= \sum_{j_1 j_2 \cdots j_{\alpha-1} j_{\alpha+1} \cdots j_{\beta-1} j_{\beta+1} \cdots j_k} a_{i_1 j_1} \cdots a_{i_{\alpha-1} j_{\alpha-1}} a_{i_{\alpha+1} j_{\alpha+1}} \cdots a_{i_{\beta-1} j_{\beta-1}} a_{j_{\beta+1} j_{\beta+1}} \cdots a_{i_k j_k} f^{(i_\alpha i_\beta)}_{j_1 \cdots j_{\alpha-1} j_{\alpha+1} \cdots j_{\beta-1} j_{\beta+1} \cdots j_k} \\ &= f^{(i_\alpha i_\beta)'}_{j_1 \cdots j_{\alpha-1} j_{\alpha+1} \cdots j_{\beta-1} j_{\beta+1} \cdots j_k} \end{aligned} \tag{12.5.11}$$

从而证明了收缩运算与 $Sp(2m)$ 群作用下的变换是可交换的.

由于收缩运算与 $Sp(2m)$ 群元素作用下的变换是可以变换的，因而无迹张量子空间 $F^{(0)}$ 是 $Sp(2m)$ 群的不变子空间.

3. $Sp(2m)$ 群的不可约张量与 $Sp(2m)$ 群的不可约表示

由前面的分析，可得到在 k 秩张量空间中分离出无迹子空间，然后用 $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = k$ 的 Young 图$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$构造出标准 Young 算子，把它作用于无迹张量子空间，即可得到具有 Young 图所标记的置换对称性的 $Sp(2m)$ 群不可约张量，这种不可约张量的全体就构成了 $Sp(2m)$ 群的不可约表示空间.

与正交群类似，可以证明只有 Young 图$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$的列数 $a \leqslant m (m = 2n)$ 才能给出非零的不可约张量，因而 $Sp(2m)$ 群的不可约表示记为$\langle \lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m \rangle$($\sum_{i=1}^{m} \lambda_i = k$).

可以证明 $Sp(2m)$ 群不可约表示 $\langle\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m\rangle$ 的维数为

$$D(\langle\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m\rangle)$$
$$=\prod_{i=1}^{m}\frac{\lambda_i+m-i+1}{m-i+1}\prod_{k>i}^{m}\frac{(\lambda_i-\lambda_k+k-i)(\lambda_i+\lambda_k+2m+2-i-k)}{(k-i)(2m+2-i-k)} \quad (12.5.12)$$

在下面的表中给出了几种 $Sp(2m)$ 群不可约表示的维数.

12.5.1 几种 $Sp(n)$ 群的不可约表示维数

$Sp(4)$			$Sp(6)$			$Sp(8)$		
k	$\langle\sigma_1\sigma_2\rangle$	$D(\sigma_1\sigma_2)$	k	$\langle\sigma_1\sigma_2\sigma_3\rangle$	$D(\sigma_1\sigma_2\sigma_3)$	k	$\langle\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4\rangle$	$D(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4)$
0	(00)	1	0	(000)	1	0	(0000)	1
1	(10)	4	1	(100)	6	1	(1000)	8
2	(20)	10	2	(200)	21	2	(2000)	36
	(11)	5		(110)	14		(1100)	27
3	(21)	16	3	(210)	64	3	(2100)	160
4	(22)	14		(111)	14		(1110)	48

4. *$U(n)$ 群不可约表示对 $Sp(n)$ $(n=2m)$ 群的分解*

$Sp(2m)$ 群是 $U(2m)$ 群的子群，因而 $U(2m)$ 群不可约表示 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ 的具有 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ 对称性的张量空间对 $Sp(2m)$ 是可约表示空间，可以约化为 $Sp(2m)$ 群不可约表示空间的直和.

如果 $U(2m)$ 群不可约表示为 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n, 0, \cdots, 0]$，即 Young 图的行数不超过 m，此时 $U(2m)$ 群不可约张量包括无迹子空间，它们构成 $Sp(2m)$ 群的不可约表示 $\langle\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m\rangle$. 而余下的无迹张量，包括收缩一次为无迹张量的部分，它们给出 $Sp(2m)$ 群 $\left(\sum_{i=1}^{m}\lambda_i-2\right)$ 秩无迹不可约张量，它们给出 $Sp(2m)$ 群的不可约表示 $\langle\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_\nu\rangle$ $(\nu\leqslant m)$，$\sum_{i=1}^{\nu}\sigma_i=\left(\sum_i\lambda_i-2\right)$. 允许的 $\langle\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_\nu\rangle$ 满足条件：

$$\langle\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_\nu\rangle\otimes[11]\text{包括}[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m]$$

$U(2m)$ 群不可约张量中剩余部分还存在经过两次收缩后的无迹张量，它们又给出 $Sp(2m)$ 群的不可约表示 $\langle\sigma_1', \sigma_2', \cdots, \sigma_k'\rangle\left(\sum_{i=1}^{k}\sigma_i'=\left(\sum_i\lambda_i-4\right)\right)$，而且满足条件

$$\langle\sigma_1', \sigma_2', \cdots, \sigma_k'\rangle\otimes[11]\otimes[11]\text{包括}[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m]$$

如此分解到最后就得出了 $Sp(2m)$ 群的全部不可约表示.

比如 $U(8)$ 群不可约表示 $[2111]$ 分解为 $Sp(8)$ 群的不可约表示为

$$U(8)\rightarrow Sp(8)$$
$$[2111]=\langle2111\rangle\oplus\langle1110\rangle\oplus\langle2100\rangle\oplus\langle1000\rangle$$

如果 $U(2m)$ 群的不可约表示为 $[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m, \lambda_{m+1}, \cdots, \lambda_n]$，这种不可约表示不包括无迹张量，因而它本身不能构成 $Sp(2m)$ 群的不可约表示. 然而把它们收缩一次或二次或三次之后，总可得到无迹张量，给出 $Sp(2m)$ 群的不可约表示 $\langle\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_m\rangle$. 此时

$$\langle \sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_m \rangle \otimes [11] \otimes \cdots \otimes [11] \text{包括} [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$$

通过这种连续操作就可把$[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$全部分解为 $Sp(2m)$ 群的不可约表示.

如 $U(8)$ 群的不可约表示[22211]的分解为

$$U(8) \rightarrow Sp(8)$$

$$[22211] = \langle 1110 \rangle \oplus \langle 2100 \rangle \oplus \langle 1000 \rangle$$

关于 $Sp(2m)$ 群不可约表示的详细讨论，可参阅 Hamermesh 的著作.

在下面的表中给出了 $U(n)$ 群到 $Sp(n)$ 群不可约表示分解的一些具体的例子.

12.5.2　几种 $U(n)$ 群不可约表示对 $Sp(n)$ 群的分解

$n=4$			$n=6$		
秩	[λ]	结构	秩	[λ]	结构
0	[0]	⟨00⟩	0	[0]	⟨000⟩
1	[1]	⟨10⟩	1	[1]	⟨100⟩
2	[2]	⟨20⟩	2	[2]	⟨200⟩
	[11]	⟨00⟩⟨11⟩		[11]	⟨000⟩⟨110⟩
3	[21]	⟨10⟩⟨21⟩	3	[21]	⟨100⟩⟨210⟩
				[111]	⟨100⟩⟨111⟩
4	[22]	⟨00⟩⟨11⟩⟨22⟩	4	[22]	⟨000⟩⟨110⟩⟨220⟩
	[211]	⟨20⟩⟨11⟩		[211]	⟨200⟩⟨110⟩⟨211⟩
			5	[221]	⟨100⟩⟨210⟩⟨111⟩⟨221⟩
				[2111]	⟨100⟩⟨111⟩⟨210⟩
			6	[222]	⟨200⟩⟨211⟩⟨222⟩
				[2211]	⟨000⟩⟨110⟩^{2}⟨220⟩⟨211⟩
				[21111]	⟨200⟩⟨110⟩

$n=8$		
秩	[λ]	结构
0	[0]	⟨0000⟩
1	[1]	⟨1000⟩
2	[2]	⟨2000⟩
	[11]	⟨0000⟩⟨1100⟩
3	[21]	⟨1000⟩⟨2100⟩
	[111]	⟨1000⟩⟨1110⟩
4	[22]	⟨0000⟩⟨1100⟩⟨2200⟩
	[211]	⟨2000⟩⟨1100⟩⟨2110⟩
	[1111]	⟨0000⟩⟨1100⟩⟨1111⟩
5	[221]	⟨1000⟩⟨2100⟩⟨1110⟩⟨2210⟩
	[2111]	⟨1000⟩⟨2100⟩⟨1110⟩⟨2111⟩
6	[222]	⟨2000⟩⟨2110⟩⟨2220⟩
	[2211]	⟨0000⟩⟨1100⟩^{2}⟨2200⟩⟨2110⟩⟨1111⟩⟨2211⟩
	[21111]	⟨2000⟩⟨1100⟩⟨2110⟩⟨1111⟩
7	[2221]	⟨1000⟩⟨2100⟩⟨1110⟩⟨2210⟩⟨2111⟩⟨2221⟩
	[22111]	⟨1000⟩⟨2100⟩⟨1110⟩^{2}⟨2210⟩⟨2111⟩
	[211111]	⟨1000⟩⟨2100⟩⟨1110⟩
8	[2222]	⟨0000⟩⟨1100⟩⟨2200⟩⟨1111⟩⟨2211⟩⟨2222⟩
	[22211]	⟨2000⟩⟨1100⟩⟨2110⟩^{2}⟨1111⟩⟨2220⟩⟨2211⟩
	[221111]	⟨0000⟩⟨1100⟩^{2}⟨2200⟩⟨2110⟩⟨1111⟩

12.5.2 $Sp(2m)$群的不可约表示与 Lie 代数法

在(9.8.18)式中给出了 Lie 代数 $sp(2m,\mathbf{C})$的基矢，它的 m 个 Cartan 子代数的基矢为

$$H_j = E_{jj} - E_{n+j,\,n+j}, \quad j = 1, 2, \cdots, m$$

因而 Cartan 子代数中任一元素可写为

$$H(l_1, l_2, \cdots, l_m) = \sum_{j=1}^{m} e_j H_j \tag{12.5.13}$$

(9.8.18)式给出 $sp(2m,\mathbf{C})$的根 $\pm(e_j \pm e_k)$, $\pm 2e_j$, $j<k=1, 2, \cdots, m$. 根空间是 m 维的，m 个素根为 $\alpha_i = e_i - e_{i+1}$, $\alpha_m = 2e_m$ $i = 1, 2, \cdots, m-1$. 由定理 10.2.5 最高权 Λ 的分量

$$\lambda_i = \frac{2(\Lambda\alpha_i)}{(\alpha_i,\ \alpha_i)}$$

为非负整数. 由此可得到

$$\lambda_i = \frac{2(\Lambda,\ e_i - e_{i+1})}{(e_i - e_{i+1},\ e_i - e_{i+1})} = \Lambda_i - \Lambda_{i+1}, \quad i = 1, 2, \cdots, m-1$$

$$\lambda_m = \Lambda_m$$

$\Lambda_i - \Lambda_{i+1}$和 Λ_m 均为非负整数，因而

$$\Lambda_1 \geqslant \Lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \Lambda_m$$

Λ_i 为最高权在基矢($e_1, e_2, \cdots, e_m$)中的分量，即

$$\Lambda = \sum_i \Lambda_i e_i \tag{12.5.14}$$

因而可用$\langle \Lambda \rangle = \langle \Lambda_1, \Lambda_2, \cdots, \Lambda_m \rangle$来表示最高权. 从而可标记 $Sp(2m)$群的不可约表示.

对于以$\langle \sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_m \rangle$标记的具有这个 Young 图的置换对称性的无迹张量构成了 $Sp(2m)$群的不可约表示.

利用 $Sp(2m)$群的元素

$$\mathscr{H} = \mathrm{e}^{H(e_1,\, e_2,\, \cdots,\, e_m)}$$

作用于上述张量，经过与 12.2 节中 $U(n)$群的类似的计算，可得到最大权为

$$\Lambda = \sum_i \sigma_i e_i$$

从而证明用 Young 图$\langle \sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_m \rangle$标记的不可约表示的最高权为$\langle \sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_m \rangle$.

我们所讨论的 $Sp(2m)$群是 Lie 代数 $sp(2m,\mathbf{C})$的紧致实形 $USp(2m)$，相应的紧致 Lie 群 $Sp(2m)$(或记为 $USp(2m)$)的矩阵即是辛矩阵又是单模酉矩阵. 因而 $Sp(2m)$的任意元素 $A \in Sp(2m)$，都可由 $U \in Sp(2m)$对角化，而得到

$$
UAU^{-1}=\begin{pmatrix}
\varepsilon_1 & & & & & & & \\
& \varepsilon_2 & & & & & & \\
& & \ddots & & & & & \\
& & & \varepsilon_m & & & & \\
& & & & \varepsilon_1^* & & & \\
& & & & & \varepsilon_2^* & & \\
& & & & & & \ddots & \\
& & & & & & & \varepsilon_m^k
\end{pmatrix},\quad |\varepsilon_i|=1
$$

因而 $Sp(2m)$群的共轭类以$(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_m)$标记. 由此可得到 $Sp(2m)$不可约表示$\langle\sigma\rangle=\langle\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_m\rangle$的特征标为

$$
X^{\langle\sigma\rangle}(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_m)=\frac{|\varepsilon^{h_1}-\varepsilon^{-h_1}, \cdots, \varepsilon^{h_m}-\varepsilon^{-h_m}|}{|\varepsilon^{m}-\varepsilon^{-m}, \cdots, \varepsilon^{1}-\varepsilon^{-1}|} \tag{12.5.15}
$$

其中 $h_i=\sigma_i+m-i+1$.

第十三章　Lorentz 群

本章只对 Lorentz 群做些简要讨论，并给出狭义相对论中的 Lorentz 变换.

13.1　Lorentz 群及其 Lie 代数 $so(3, 1)$

13.1.1　Lorentz 群的定义

在 11.1.2 节中曾简单说明非紧致 Lie 群 $U(m, p)$ 和 $O(m, p)$，在 n 维 Eucilid 空间 R_n 中，保持二次形

$$(x, y) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

不变的全部变换构成 $O(n)$ 群，这些变换的矩阵表示为 $n\times n$ 的正交矩阵. 如若 $n=4$，则为 4 维 Eucilid 空间的正交群 $O(4)$. 对于 4 维赝 Eucilid 空间度规张量为

$$g=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix},\quad g^2=E$$

则保持二次形

$$(x, y) = \tilde{x}gy = \sum_{ij} x_i g_{ij} y_j = \sum_{i=1}^{3} x_i y_i - x_4 y_4 \tag{13.1.1}$$

不变的全部变换构成 $so(3, 1)$ 群，相应 Lie 代数为 $so(3, 1)$. 这种群就是 Lorentz 群，通常记为 $L(4)$.

当 4×4 矩阵 $A\in L(4)$ 时，由于它保持二次形(13.1.1)不变，由此得到

$$\widetilde{Ax}\, gAy = \tilde{x}\tilde{A}gAy = \tilde{x}gy \tag{13.1.2}$$

即要求 $L(4)$ 群的所有 4×4 矩阵满足条件

$$\tilde{A}gA = g \tag{13.1.3}$$

(13.1.3)式也可作为 Lorentz 群的定义，即所有满足条件(13.1.2)式的 4×4 矩阵构成 Lorentz 群.

有的书上取

$$g=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

所得二次形为

$$(x, y) = -\sum_{i=1}^{3} x_i y_i + x_4 y_4$$

与上述结果是完全等价的.

(13.1.2)式的分量形式为

$$(Ax, Ay) = \sum_{i=1}^{3} x_i' y_i' - x_4' y_4' = \sum_{i=1}^{3} x_i y_i - x_4 y_4 \tag{13.1.2'}$$

容易得到

$$(Ax, Ay) = \sum_{jk} \left(\sum_{i=1}^{3} a_{ij} a_{ik} - a_{4j} a_{4k} \right) x_j y_k$$

a_{ij}为矩阵 A 的矩阵元，由此得到

$$\sum_{i=1}^{3} x_i y_i - x_4 y_4 = \sum_{jk} \left(\sum_{i=1}^{3} a_{ij} a_{ik} - a_{4j} a_{4k} \right) x_j y_k$$

因而要求

$$\sum_{i=1}^{3} a_{ij} a_{ik} - a_{4j} a_{4k} = \delta_{jk} \begin{cases} -1, & j = k = 4 \\ 1, & j = k = 1, 2, 3 \end{cases} \tag{13.1.4}$$

(13.1.4)式给出了 Lorentz 群的矩阵 A 对矩阵元的约束，使得 16 个矩阵元只有 6 个独立变化的，因而 $L(4)$ 群为 6 个参数的 Lie 群.

下面证明满足条件(13.1.3)的矩阵确实构成群.

(1) 4×4 的单位矩阵 E 显然满足(13.1.3)式，因而 $L(4)$ 中包括单位元.

(2) $A \in L(4)$ 时它的逆为

$$A^{-1} = g \tilde{A} g \tag{13.1.5}$$

因为

$$AA^{-1} = Ag\tilde{A}g = gg = E$$

$$A^{-1}A = g\tilde{A}gA = gg = E$$

因而容易得到

$$\tilde{A}^{-1} g A^{-1} = (g\tilde{A}g)^t gg\tilde{A}g = gAggg\tilde{A}g$$

$$= gAg\tilde{A}g = ggg = g$$

即 $A^{-1} \in L(4)$.

(3) 若 A, $B \in L(4)$，则

$$\widetilde{AB}\, gAB = \tilde{B}\tilde{A}gAB = \tilde{B}\, gB = g$$

即 $AB \in L(4)$，即矩阵集合 $L(4)$ 是封闭的.

(4) 矩阵运算满足结合律.

这就证明了 $L(4)$ 是一个群.

13.1.2 Lorentz 群的 Lie 代数

由满足(13.1.3)式的 4×4 矩阵构成的 Lorentz 群，它的无穷小生成元 $\mathscr{A}$ 满足条件

$$g\mathscr{A}g = -\mathscr{A} \tag{13.1.6}$$

因而 $\mathscr{A}$ 指数映射后 $\mathscr{A} \Rightarrow A = e^{\mathscr{A}}$，即

$$A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathscr{A}^n$$

于是可证明

$$\tilde{A} g A = \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{1}{m!n!} \tilde{A}^m g \mathscr{A}^n = g$$

因此 Lorentz 群的 Lie 代数 $o(3, 1)$ 为

$$p(3, 1) = \{\mathscr{A}, \mid \tilde{\mathscr{A}} = -g\mathscr{A}g\} \tag{13.1.7}$$

由 g 的定义容易看到 $\mathscr{A}$ 与 $\tilde{\mathscr{A}}$ 有相同的对角元，但是(13. 1. 5)式又要求 $\tilde{\mathscr{A}}_{ii} = -\mathscr{A}_{ii}$，因而 $\mathscr{A}$ 只能是对角元为零的 4×4 矩阵. 它们只能有如下形式，即

$$\mathscr{A} = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha_3 & \alpha_2 & \beta_1 \\ \alpha_3 & 0 & -\alpha_1 & \beta_2 \\ -\alpha_2 & \alpha_1 & 0 & \beta_3 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & 0 \end{pmatrix}$$

其中 α_1，α_2，α_3，β_1，β_2，β_3 为任意实参数.

通常取如下的 6 个矩阵为 Lie 代数 $o(3, 1)$ 的基矢，即

$$\begin{cases} \mathscr{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathscr{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathscr{A}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathscr{B}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathscr{B}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathscr{B}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{cases} \tag{13.1.8}$$

容易证明 α_i，β_i 之间满足如下的交换关系，即

$$\begin{aligned} [\mathscr{A}_i, \mathscr{A}_j] &= \varepsilon_{ijk}\alpha_k \\ [\mathscr{B}_i, \mathscr{B}_j] &= -\varepsilon_{ijk}\alpha_k \\ [\mathscr{B}_i, \mathscr{A}_j] &= \varepsilon_{ijk}\beta_k \end{aligned} \tag{13.1.9}$$

由第九章可知它们构成 Lie 代数 $o(3, 1)$，其中 ε_{ijk} 为反对称张量，

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & i, j, k \text{ 为 } 1, 2, 3 \text{ 的偶置换} \\ -1, & i, j, k \text{ 为 } 1, 2, 3 \text{ 的奇置换} \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \tag{13.1.10}$$

由(13. 1. 9)式可看到$\{\alpha_i, i=1, 2, 3\}$构成 $o(3, 1)$ 的子代数 $o(3)$. 它们构成的 Lie 群 $O(3)$ 为 $L(4)$ 的子群，这个子群的矩阵具有形式

$$\begin{pmatrix} & & & 0 \\ & R & & 0 \\ & & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad R \in O(3) \tag{13.1.11}$$

13.1.3 Lorentz 群的紧致性和连通性

1. Lorentz 群是非紧致 Lie 群

由 $\mathscr{B}_i$ 的指数映射可得到 $L(4)$ 群的元素，如

$$e^{b\mathscr{B}_3}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&\cosh b&\sinh b\\0&0&\sinh b&\cosh b\end{pmatrix}\in L(4) \tag{13.1.12}$$

对于 $\mathscr{B}_1$，$\mathscr{B}_2$ 也可得到类似形式的矩阵. 由于双曲函数 $\cosh b$ 和 $\sinh b$ 是无界函数，因而 Lorentz 群是非紧致 Lie 群. 这一点由(13.1.4)式也可以看到.

2. Lorentz 群的连通性

由 $\tilde{A}gA=g$，$A\in L(4)$ 可得到 $A\in L(4)$ 的行列式为

$$\det(\tilde{A}gA)=-(\det\tilde{A})^2=\det g=-1$$

因而

$$\det A=\pm 1,\qquad A\in L(4) \tag{13.1.13}$$

单位元 E 的行列式为 1，$\det g=-1$，E，$g\in L(4)$. 因而 Lorentz 群是非连通的.

由(13.1.4)式可以得到 $a_{44}^2\geqslant 1$，因而得到 $a_{44}\geqslant 1$ 和 $a_{44}\leqslant -1$ 两种情况. 因此可把 $L(4)$ 群的矩阵分为四类：

$$L_+^{\uparrow}:\det A=1,\ a_{44}\geqslant 1,\quad L_-^{\uparrow}:\det A=-1,\ a_{44}\geqslant 1$$

$$L_+^{\downarrow}:\det A=1,\ a_{44}\leqslant -1,\quad L_-^{\downarrow}:\det A=-1,\ a_{44}\leqslant -1$$

它们构成 $L(4)$ 群的相互不连通的四个叶(每个叶上的元素是连通的). 即 Lorentz 群是非连通的，包括四个连通叶.

$L_+^{\uparrow}$ 叶上的元素构成 $L(4)$ 群的子群，称为固有 Lorentz 群(proper lorentz group)，一般记为 L_P

如果把 Lorentz 群的 4 维空间前 3 维认为是空间坐标，第 4 维认为是时间坐标，则 $g\in L(4)$ 代表时间反演. $S=-g\in L(4)$ 则为空间反演，而 $-E=Sg=gS$ 为时空反演. 这样可看到固有 Lorentz 群作为 $L(4)$ 群的子群不包括时间反演(g)，也不包括空间反演(S). 而第二叶 $L_-^{\uparrow}$ 上包括空间反演 S 而不包括时间反演($a_{44}\geqslant 1$，g 不在此叶上). 第三叶 $L_-^{\downarrow}$ 上包括时间反演，而不包括空间反演($S=-g$，$a_{44}\geqslant 1$). 第四叶 $L_-^{\downarrow}$ 上即包括空间反演也包括时间反演，当然也包括时空反演.

容易证明，这四个叶都可由固有 Lorentz 群 $L_+^{\uparrow}$(或 L_P)经过 S，g 和 $-E$ 而得到，即

$$\begin{cases}L_-^{\downarrow}=SL_+^{\uparrow}=L_+^{\uparrow}S\\ L_+^{\downarrow}=(-E)L_+^{\uparrow}=L_+^{\uparrow}(-E)\\ L_-^{\uparrow}=gL_+^{\uparrow}=L_+^{\uparrow}g\end{cases} \tag{13.1.14}$$

固有 Lorentz 群 $L_+^{\uparrow}(L_P)$ 是 Lorentz 群的子群，因为子群 $L_+^{\uparrow}$ 中包括了 $a_{44}\geqslant 0$ 的全部单模矩阵，容易证明这些矩阵中包括了它们的全部共轭类，因而 $L_+^{\uparrow}$ 还是 $L(4)$ 的不变子群. 商群 $L(4)/L_P=\{E,\ -E,\ g,\ S\}$ 为阶为四的分立群，即

$$L(4)=L_+^{\uparrow}\oplus gL_+^{\uparrow}\oplus SL_+^{\uparrow}\oplus(-E)L_+^{\uparrow}$$

$$L(4)/L_P = \{E, -E, g, s\} \tag{13.1.15}$$

在 Lorentz 群的四个不连通的叶中，箭头↑或↓代表时间轴的取向. 亦即当 $a_{44} \geqslant 1$ 时，箭头向上(↑)表示时间向前流逝，因而称为“前向类时”的；而 $a_{44} \leqslant -1$，箭头向(↓)，表示时间向后流逝，也称“后向类时”的.

13.2 Lorentz 群的参数化

Lorentz 群包括 6 个连续参数，可以对固有 Lorentz 群 $L_+^\uparrow$(或 L_P)进行参数化，通过 $-E$，g，就可得到整个 Lorentz 群了.

下面讨论一种最常用的参数化方法(定理 13.2.1)，为此，先证明两个引理.

引理 1 若 $A \in L_+^\uparrow$，则 $A \in SO(3)$(这里 $SO(3)$ 群的元素 A 指(13.1.11)式描述的 4×4 矩阵)的充要条件是 $a_{44} = 1$.

证明 由(13.1.4)式得到

$$\sum_{i=1}^{3} a_{i4}^2 = \sum_{i=1}^{3} a_{4i}^2 = a_{44}^2 - 1$$

由于 $A \in L_+^\uparrow$，因而 $a_{44} \geqslant 1$，因此当且仅当 $a_{44} = 1$ 时，

$$\sum_{i=1}^{3} a_{i4}^2 = \sum_{i=1}^{3} a_{4i}^2 = 0$$

这便证明了此引理.

引理 2 若 $A, A' \in L_+^\uparrow$，则

$$A = A'R, \quad R \in SO(3) \tag{13.2.3}$$

的充要条件是

$$Ae = A'e \tag{13.2.4}$$

其中 e 为基矢

$$e = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{13.2.5}$$

证明 $Ae = A'e$ 意味着

$$Ae = \begin{pmatrix} a_{14} \\ a_{24} \\ a_{34} \\ a_{44} \end{pmatrix} = A'e = \begin{pmatrix} a'_{14} \\ a'_{24} \\ a'_{34} \\ a'_{44} \end{pmatrix}$$

即 $a_{14} = a'_{14}$，$a_{24} = a'_{24}$，$a_{34} = a'_{34}$，$a_{44} = a'_{44}$. 如果 $Ae = A'e$，则

$$R = (A')^{-1} A \in SO(3) \tag{13.2.6}$$

由 $(A')^{-1} = g\,\widetilde{A'}\,g$，立即可证明(13.2.9)式. 反之如果 $A = A'R$，由于 $Ae = e$，即可得到

$$Ae = A'Re = A'e$$

这就证明了此引理.

定理 13.2.1　固有 Lorentz $L_+^\uparrow$ 的任意元素 $A\in L_+^\uparrow$ 都可表示为

$$A=R_1(\exp b\mathscr{B}_3)R_2,\ R_1,\ R_2\in SO(3) \tag{13.2.1}$$

其中 $\exp(b\beta_3)$ 为(13.1.12)式描述的矩阵，R_1，R_2 为(13.1.11)式描述的 4×4 的 $SO(3)$ 群的矩阵，

$$R_i(\alpha,\beta,\gamma)=\begin{pmatrix} & & & 0\\ & \bar{R}_i & & 0\\ & & & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\quad i=1,\ 2 \tag{13.2.2}$$

$\bar{R}_i(\alpha,\beta,\gamma)$ 为用 Euler 角 α, β, γ 表示的 $SO(3)$ 群的矩阵，$\bar{R}_1$ 的 Euler 角为 $\alpha_1+\frac{\pi}{2}$, β_1, 0, $\bar{R}_2$ 的 Euler 角为 α_2, β_2, γ_2.

(13.1.16)式给出了固有 Lorentz 群的参数化，它由 6 个连续参数 α_1, β_1, α_2, β_2, γ_2 和 b 所描述.

证明　(1) $A=R_i(\exp b\mathscr{B}_3)R_2\in L_+^\uparrow$.

取(13.2.1)式的行列式，即

$$\det[R_1(\exp b\mathscr{B}_3)R_2]=\det R_1\det(\exp b\mathscr{B}_3)\det R_2=1$$

另一方面

$$\begin{aligned}[R_1\exp(b\mathscr{B}_3)R_2]_{44}&=(R_1)_{4k}(\exp(b\mathscr{B}_3))_{kl}(R_2)_{l4}\\&=[\exp(b\mathscr{B}_3)]_{44}=\cosh b\geqslant1\end{aligned}$$

这便证明了(13.2.1)式描述了 $L_+^\uparrow$ 的元素.

(2) 取 $b=0$，此时 $a_{44}=\cosh b=1$，由引理 1 可证明(13.2.1)式包括了 $L_+^\uparrow$ 的子群 $SO(3)$ 的所有元素.

(3) (13.2.1)式穷尽了 $L_+^\uparrow$ 的所有元素. 为了证明这一点取 $A\in L_+^\uparrow$ 的元素，$a_{44}>1$，则

$$a_{14}^2+a_{24}^2+a_{34}^2=a_{44}^2-1=r^2>0\quad(r_3^2=a_{44}^2-1>0) \tag{13.2.7}$$

为证明这一点取 $A\in L_+^\uparrow$，$a_{44}>1$，则

$$a_{14}^2+a_{24}^2+a_{34}^2-a_{44}^2-1=r^2>0\quad(r^{(\text{任意})}=a_{44}^2-1) \tag{13.2.8}$$

于是

$$a_{44}^2-r^2=1$$

即 $a_{44}^2=(\cosh b)^2$，因而 $r^2=(\sinh b)^2$，这样便可得到

$$b=\mathrm{lu}[a_{44}+(a_{44}^2-1)^{1/2}] \tag{13.2.9}$$

这说明由 a_{44} 可唯一地确定一个 b.

另一方面由(13.2.7)式看到了选择一个球坐标系(γ, θ, φ)，令

$$a_{14}=r\sin\theta\cos\varphi,\ a_{24}=r\sin\theta\sin\varphi,\ a_{34}=r\cos\theta$$

它们满足方程(13.2.7). 由第一章给出的 Euler 角表达的转动矩阵 $R_1(\varphi+\frac{\pi}{2},\theta,0)$ (φ

$+\frac{\pi}{2}$, θ, φ 为 Euler 角, $\varphi\neq0$)满足条件

$$R_1\begin{pmatrix}0\\0\\r\\a_{44}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_{14}\\a_{24}\\a_{34}\\a_{44}\end{pmatrix}$$

显然 $R_1\exp b\mathscr{B}_3\in L_+^\uparrow$，而容易证明

$$R_1\exp b\mathscr{B}_3E=Ae$$

由引理 2 存在一个 $R_2\in SO(3)$，使 $A=R_1\exp b\mathscr{B}_3R_2\in L_+^\uparrow$，若 $A\in L_+^\uparrow$，$a_{44}\geqslant1$，因而 A 作用于基矢 e，则为

$$Ae=A\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_{14}\\a_{24}\\a_{34}\\a_{44}\end{pmatrix}$$

由引理 1 就证明了定理 13.2.1. 从而固有 Lorentz 群 $L_+^\uparrow$ 的元素可由(13.2.1)式表示.

虽然当 $b=0$ 时，$A(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)\in SO(3)$ 与 $L_+^\uparrow$ 中的 $b=0$ 的元素并非一一对应. 但是这些不是一一对应的点，形成群空间的一个较低维的流形. 因而，不影响不变测度，亦即不影响用这种参数化研究 Lorentz 群的问题.

13.3 Poicare 群与 Lorentz 变换

13.3.1 Poicare 群

如果把时间和空间看成是 4 维的实流形(manifold)，称这个 4 维实空间为 Minkowski 空间. 其中向量 $x=(x_1,x_2,x_3,x_4)=(\boldsymbol{x},x_4)$，$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)$ 为空间坐标 $x_4=ct$，t 为时间坐标，c 为真空中光速，$x_i(i=1,2,3,4)$ 取遍所有实数，x 即为 Minkowski 空间 $M^{(4)}$ 中的点.

在 Minkowski 空间中选定一组坐标系，则两个点 x 和 y 间的时空距离的平方定义为

$$\|x-y\|^2=\sum_{i=3}^{3}(x_i-y_i)^2-(x_4-y_4)^2=\widetilde{(x-y)}\;g(x-y)\quad(13.3.1)$$

其中

$$x=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{pmatrix},\quad\tilde{x}=(x_1,x_2,x_3,x_4)\quad(13.3.2)$$

如果对于另一个坐标系 $\mathscr{T}'$，在这个坐标系中点 x 和 y 的坐标为 x', y'，如果

$$\|x-y\|=\|x'-y'\|\quad(13.3.3)$$

则称坐标系 $\mathscr{T}'$相对于 $\mathscr{T}$是惯性坐标系. 如果坐标系 $\mathscr{T}'$相对于坐标 $\mathscr{T}$是惯性坐标系，则两个坐标系间坐标的变换为

$$x' = Ax + r \tag{13.3.4}$$

分量式为

$$x_i' = \sum_{k=1}^{4} a_{ik}x_k + r_i, \quad i = 1, 2, 3, 4 \tag{13.3.4'}$$

其中 a_{ij}为 4×4 矩阵 A 的矩阵元，$A\in L(4)$，$r=(r_1, r_2, r_3, r_4)$为一个 4 维向量.

如果坐标系 $\mathscr{T}'$与坐标系 $\mathscr{T}$间坐标间的变换具有(13.3.4)式的形式，则 $\mathscr{T}'$也是一个惯性系.

由惯性系的定义可得到如果 $\mathscr{T}'$对 $\mathscr{T}$是惯性系，$\mathscr{T}''$对 $\mathscr{T}'$也是惯性系，则 $\mathscr{T}''$对 $\mathscr{T}$也是惯性系. 因而 Minkowski 空间 $M^{(4)}$中的一点 P，在惯性系 $\mathscr{T}$，$\mathscr{T}'$，$\mathscr{T}''$中的坐标为

$$
\begin{aligned}
x_i' &= \sum_{k=1}^{4} a_{ik}x_k + r_i \\
a_i'' &= \sum_{l=1}^{4} a_{il}'x_l' + r_i' \\
&= \sum_{l=1}^{4} \Big(\sum_{l=1}^{4} a_{il}'a_{lk}x_k + a_{il}'r_l \Big) + a' \\
&= \sum_{k=1}^{4} \Big(\sum_{l=1}^{4} a_{il}'a_{lk} \Big) x_k + \Big(\sum_{l=1}^{4} a_{il}'r_l + r_i' \Big)
\end{aligned}
$$

因而惯性系 $\mathscr{T}''$中的坐标 x''直接由 $\mathscr{T}$坐标变换而得到，可写为

$$a_i'' = \sum_k a_{ik}''x_k + r_i''$$

比较上述两式得到

$$A'' = A'A, \quad r'' = A'r + r' \tag{13.3.5}$$

与 5.1 节讨论的 Eucilid 群 E^3 相似把 Minkoski 空间的非齐次变换记为

$$\{A|r\}x = x' \tag{13.3.6}$$

分量形式为

$$x_i' = \sum_{k=1}^{4} a_{ik}x_k + r_i, \quad A \in L(4), \quad r \in M^{(4)}$$

而 Minkowsk 空间 $M^{(4)}$中非齐次变换$\{A'|r'\}$与$\{A|r\}$之积由(13.3.5)定义，即

$$\{A'|r'\}\{A|r\} = \{A'A|A'r + r'\} \tag{13.3.7}$$

(13.3.7)式与 $E^{(3)}$群元素之积(5.1.7)在形式上是一致的.

由(13.3.7)式可看到$\{A|a\}$的逆为$\{A|r\}^{-1} = \{A^{-1}| -A^{-1}r\}$，而且$\{E|0\}$($E$ 为 4×4 单位矩阵)为恒等变换，因而全部保持 Minkowski 空间时空距离不变的变换$\{A|r\}$构成一个群，称为 Poicare 群，记为 $P(4)$群或非齐次 Lorentz 群(与之相对应 Lorentz 群 $L(4)$也称为齐次 Lorentz 群，因为它给出 Minkowski 空间的齐次变换).

Poicare 群 $P(4)$保持 Minkowski 空间两点 x 与 y 间时空距离不变是显而易见的，因为

$$x' = \{A|r\}x = Ax + r$$

$$x' - y' = A(x - y)$$

于是

$$\begin{aligned} \| x' - y' \| &= (\widetilde{x' - y'})\, g(x' - y') \\ &= A(\widetilde{x - y})\, gA(x - y) \\ &= (\widetilde{x - y})\ \tilde{A}gA(x - y) \\ &= (\widetilde{x - y})\ g(x - y) \end{aligned}$$

当 $A \in O(3)$, $r = (r_1, r_2, r_3, 0)$时得到 Poicalre 群的子群，它同构于 Euciled 群 $E^{(3)}$.

13.3.2 Lorentz 变换及其物理意义

为了说明狭义相对论中的 Lorentz 变换，下面给出关于固有 Lorentz 群 $L_+^\uparrow$ 元素 A 的另一个分解形式.

定理 13.3.1 固有 Lorentz 群 $L_+^\uparrow$ 的任一元素 $A \in L_+^\uparrow$ 都可唯一地表示为

$$A = V(b)R, \quad R \in SO(3) \tag{13.3.8}$$

其中

$$V(b) = \exp(b_1\mathscr{B}_1 + b_2\mathscr{B}_2 + b_3\mathscr{B}_3) \tag{13.3.9}$$

$\mathscr{B}_1$, $\mathscr{B}_2$, $\mathscr{B}_3$ 为固有 Lorentz 群的 Lie 代数 $so(3, 1)$的基矢. $V(b)$称为速度变换.

证明 由定理 13.2.1 的(13.2.1)式知道每个 $A \in L_+^\uparrow$ 都可表示为

$$A = R_1(\alpha_1, \beta_1, 0)\exp(b\mathscr{B}_3)R_2(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2)$$

上一节中已指出

$$\begin{gathered} a_{14} = r\sin\beta_1\cos\alpha_1, \quad a_{24} = r\sin\alpha_1\sin\beta_1, \quad a_{34} = r\cos\beta_1 \\ a_{44} = \cosh b, \quad r = \sinh b, \quad b \geqslant 0 \end{gathered} \tag{13.3.10}$$

把(13.2.1)式写为

$$A = R_1\exp(b\mathscr{B}_3)R_1^{-1}R_1R_2$$

并令

$$B(t) = R_1(\alpha_1, \beta_1, 0)\exp(b\mathscr{B}_3)R_1(\alpha_1, \beta_1, 0)^{-1} \tag{13.3.11}$$

当 t 取所有实数时，$B(t)$构成 $L_+^\uparrow$ 的一个单参数子群. 而

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}B(t)\right|_{t=0} = R_1(\alpha_1, \beta_1, 0)b\mathscr{B}_3R_1(\alpha_1, \beta_1, 0)^{-1} \tag{13.3.12}$$

称为在 $t = 0$ 的邻域内，$B(t)$的切矩阵. 它完全决定了子群 $B(t)$.

在(13.3.11)式中代入 R_1, β_3, R_1^{-1} 的表达式，立即得到

$$R_1(\alpha_1, \beta_1, 0)b\beta_2R_1(\alpha_1, \beta_1, 0)^{-1}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\alpha_1\cos\beta_1 & -\sin\alpha_1 & \cos\alpha_1\sin\beta_1 & 0 \\ \sin\alpha_1\cos\beta_1 & \cos\alpha_1 & \sin\alpha_1\sin\beta_1 & 0 \\ -\sin\beta_1 & 0 & \cos\beta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\cdot b\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\alpha_1\cos\beta_1&\sin\alpha_1\cos\beta_1&-\sin\beta_1&0\\-\sin\alpha_1&\cos\alpha_1&0&0\\\cos\alpha_1\sin\beta_1&\sin\alpha_1\sin\beta_1&\cos\beta_1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0&0&0&b\cos\alpha_1\sin\beta_1\\0&0&0&b\sin\alpha_1\sin\beta_1\\0&0&0&b\cos\beta_1\\b\cos\alpha_1\sin\beta_1&b\sin\alpha_1\sin\beta_1&b\cos\beta_1&0\end{pmatrix}$$

$$=b\cos\alpha_1\sin\beta_1\mathscr{B}_1+b\sin\alpha_1\sin\beta_1\mathscr{B}_2+b\cos\beta_1\mathscr{B}_3$$

注意 $\mathscr{B}_1$，$\mathscr{B}_2$，$\mathscr{B}_3$ 是(13.1.8)定义的为 4×4 矩阵. 令：

$$b_1=r\cos\alpha_1\sin\beta_1,\quad b_2=r\sin\alpha_1\sin\beta_1,\quad b_3=r\cos\beta_1 \tag{13.3.13}$$

由切矩阵(13.3.12)得到矩阵 $B(t)$ 为

$$B(t)=\exp[(b_1\mathscr{B}_1+b_2\mathscr{B}_2+b_3\mathscr{B}_3]=V(tb) \tag{13.3.14}$$

令 $t=1$，则

$$A=V(b)R_1R_2=V(b)R,\quad R=R_1R_2 \tag{13.3.15}$$

这便证明了此定理.

(13.3.15)式表示非奇异矩阵 $A\in L_+^\uparrow$ 可分解为一个正定的矩阵 $V(b)$ 和一个正交矩阵 R 之积，这种分解为极分解. 因为 $\mathscr{B}_1$，$\mathscr{B}_2$，$\mathscr{B}_3$ 是对称矩阵，因而 $V(b)$ 是正定的矩阵.

对于 Mincowski 空间 $M^{(4)}$ 中的一点 $x=(x,\ ct)$，$A\in L_+^\uparrow$ 使之变为

$$Ax=V(b)R\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\ct\end{pmatrix}=V(b)\begin{pmatrix}x_1'\\x_2'\\x_3'\\ct\end{pmatrix} \tag{13.3.16}$$

即 x 的空间坐标 $x=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}$ 经历一个转动 R 变为 $x'=\begin{pmatrix}x_1'\\x_2'\\x_3'\end{pmatrix}$，然后再进行速度交换 $V(b)$.

对于空间坐标原点 $x=(0,\ 0,\ 0)$ 在时刻 t 时，Mincowski 空间的点为

$$x=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\ct\end{pmatrix}$$

经过 $V(b)$ 的变换为

$$V(b)\begin{pmatrix}0\\0\\0\\ct\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x_1'\\x_2'\\x_3'\\ct'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x'\\ct'\end{pmatrix} \tag{13.3.17}$$

由(13.3.9)式可得到

$$V(b)\begin{pmatrix}0\\0\\0\\ct\end{pmatrix}=ct\begin{pmatrix}\sinh b\cos\alpha_1\sin\beta_1\\\sinh b\sin\alpha_1\sin\beta_1\\\sinh b\cos\beta_1\\\cosh b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x'\\ct'\end{pmatrix} \tag{13.3.18}$$

因而

$$t'=\cosh bt$$
$$x'=ct\begin{pmatrix}\sinh b\cos\alpha_1\sin\beta_1\\\sinh b\sin\alpha_1\sin\beta_1\\\sinh b\cos\beta_1\end{pmatrix}=ct'\frac{\sinh b}{\cosh b}\begin{pmatrix}\cos\alpha_1\sin\beta_1\\\sin\alpha_1\sin\beta_1\\\cos\beta_1\end{pmatrix} \tag{13.3.19}$$

令

$$\boldsymbol{X}'=\boldsymbol{V}t' \tag{13.3.20}$$

则

$$\boldsymbol{V}=C\frac{\sinh b}{\cosh b}\frac{\boldsymbol{b}}{b}=c\tanh b\frac{\boldsymbol{b}}{b} \tag{13.3.21}$$

$\boldsymbol{b}/b$ 为 b 方向上的 3 维单位向量.

按定义 $\sinh b=r$，$\cosh b=\sqrt{1+r^2}$，于是

$$\boldsymbol{V}=\frac{cr}{(\sqrt{1+r^2})}\hat{b},\quad \hat{b}=\frac{\boldsymbol{b}}{b} \tag{13.3.22}$$

或

$$\sinh b=\frac{\frac{v}{c}}{\sqrt{1-v^2/c^2}},\quad \cosh b=\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}},\quad v=|\boldsymbol{V}| \tag{13.3.23}$$

如果速度沿空间坐标 z 方向，则 $b_1=b_2=0$，$b=b_3$，于是(13.3.17)式变为

$$V(b)=\exp b\beta_3=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&\cosh b&\sinh b\\0&0&\sinh b&\cosh b\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&1/\gamma&v/\gamma\\0&0&v/\gamma&1/\gamma\end{pmatrix},\quad \gamma=\sqrt{1-v^2/c^2} \tag{13.3.24}$$

由此得到交换

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ ct' \end{pmatrix} = v(b) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ ct \end{pmatrix}$$

为

$$x' = x, \quad y' = y, \quad z' = \frac{z + vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad t' = \frac{t + zv/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \tag{13.3.25}$$

这就是一般狭义相对论中的 Lorentz 变换.

(13.3.25)式的物理意义是惯性系 $\mathscr{T}$ 中的点 $x = (0, 0, 0, ct)$，在以速度变换 $V(b)$ 决定的另一个惯性系 $\mathscr{T}'$ 中变为 x'. 固有 Lorentz 群 $L_+^\uparrow$ 的一般元素 $A = V(b)R$，表明 Lorentz 变换实质上是先进行一个空间转动，然后再进行速度变换.

在相对论出现之前，都认为时间与空间是完全无关的，分别独立的，也就是绝对空间和绝对时间的观念. 然而在包括了时间和空间的 Minkowski 四维空间中，时间与空间是紧密相关的，(3.3.25)式给出了这种联系，这是时空概念上的一次革命性飞跃.

13.4　$SL(2)$ 群与 $L_+^\uparrow$ 群同态

在第十章中已经讨论了 $SU(2)$ 群与 $SO(3)$ 群同态，而且 $SU(2)$ 群是 $SO(3)$ 群的二重覆盖群，与此十分类似，$SL(2)$ 群也与 $L_+^\uparrow$ 群同态，并且是 $L_+^\uparrow$ 的二重覆盖群. 下面就讨论这一问题.

13.4.1　Lie 代数 $sl(2)$ 与 $so(3, 1)$ 同构

固有 Lorentz 群 $L_+^\uparrow$ 的无穷小生成元是由(13.1.8)式给出，它们构成 Lie 代数 $so(3)$，(13.1.9)式给出它们的代数结构.

全部迹为零的 2×2 复矩阵

$$\mathscr{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & -a_{11} \end{pmatrix}, \quad a_{ij} \in \mathbf{C}$$

构成了 Lie 代数 $sl(2)$，把它看到实 Lie 代数是 6 维的(复 Lie 代数是 3 维的)，基矢可取为

$$\begin{cases} \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, & \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \sigma_4 = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, & \sigma_5 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & \sigma_6 = \begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} \end{cases} \tag{13.4.1}$$

任一迹为零的 2×2 复矩阵都可表示为

$$\sum_{i=1}^{6} \alpha_i \sigma_i = \begin{pmatrix} (\alpha_3 + \mathrm{i}\alpha_6) & \alpha_1\alpha_5 + \mathrm{i}(\alpha_2 + \alpha_4) \\ (\alpha_1 - \alpha_5) + \mathrm{i}(\alpha_4 - \alpha_2) & -(\alpha_3 + \mathrm{i}\alpha_6) \end{pmatrix} \in sl(2), \quad \alpha_i \in \mathbf{R}$$

容易证明(13.3.26)式给出的 Lie 代数 $sl(2)$ 的基矢满足交换关系(13.1.9)，因而 Lie 代数 $sl(2)$ 与 $so(3, 1)$ 同构.

13.4.2 $SL(2)$群与$L_+^\uparrow$群的同态关系

Lie 代数$sl(2)$的基矢为无穷小生成元的 Lie 群是$SL(2)$群，即由2×2矩阵构成的群. 由于$sl(2)$与$so(3, 1)$同构，因而$SL(2)$群与$L_+^\uparrow$群局部同构. 但在整个上它们同态，而并非同构. 下面讨论这一问题.

Mincowski 空间$M^{(4)}$中任意一点$x=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{pmatrix}$，可映射为一个$2\times2$的 Hermitain 矩阵$\hat{x}$，即

$$\hat{x}=\begin{pmatrix}-x_1+x_4 & x_3-\mathrm{i}x_2\\ x_3+\mathrm{i}x_2 & x_2+x_4\end{pmatrix}=\hat{x}^+,\quad x_i\in\mathbf{R}\quad(i=1,2,3,4) \tag{13.4.2}$$

矩阵$\hat{x}$的行列式为

$$\det\hat{x}=x_4^2-x_1^2-x_2^2-x_3^2=-(x,x)=-x_ig_{ii}x_i \tag{13.4.3}$$

即 Hermitain 矩阵$\hat{x}$与 Mincowski 空间中的点一一对应，而且$\hat{x}$的行列式等于向量x长度的负值. 通过这种映射可把$SL(2)$群对 Mincowski 空间的作用转换为$SL(2)$群对2×2的 Hermitain 矩阵的作用.

取$SL(2)$群的任一元素2×2单模复矩阵

$$A=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{pmatrix},\quad \alpha\delta-\gamma\beta=1,\quad \alpha,\beta,\gamma,\delta\in\mathbf{C}$$

用它作用于$\hat{x}$为

$$A\hat{x}A^+=\hat{x}' \tag{13.4.4}$$

显然$\hat{x}'$也是 Hermitain 矩阵，而且

$$\hat{x}'=\begin{pmatrix}-x_1'+x_4' & x_3'-\mathrm{i}x_2'\\ x_3'+\mathrm{i}x_2' & x_2'+x_4'\end{pmatrix}$$

因而(13.4.4)式等价于

$$Ax=x' \tag{13.4.5}$$

由于

$$\det\hat{x}'=\det A\det\hat{x}\det A^+=\det\hat{x}\quad(A\text{ 为单模矩阵}) \tag{13.4.6}$$

亦即A变换$\hat{x}\to\hat{x}'$时保持$\hat{x}$的行列式不变，因而A一定对应于保持 Mincowski 空间向量长度不变的一个 Lorentz 群的元素$L_A\in L(4)$.

为了具体看到A对应于什么样的L_A，具体写出(13.3.24)式，由

$$A\hat{x}A^+=\hat{x}'$$

可得到

$$\begin{pmatrix} x_4' - x_1' \\ x_3' - \mathrm{i}x_2' \\ x_3' + \mathrm{i}x_2' \\ x_4' + x_1' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha\alpha^* & \alpha\beta^* & \alpha^*\beta & \beta\beta^* \\ \alpha\gamma^* & \alpha\delta^* & \beta\gamma^* & \beta\delta^* \\ \alpha\gamma^* & \beta^*\gamma & \alpha^*\delta & \beta^*\delta \\ \gamma\gamma^* & \gamma\delta^* & \gamma^*\delta & \delta\delta^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_4 - x_1 \\ x_3 - \mathrm{i}x_2 \\ x_3 + \mathrm{i}x_2 \\ x_1 + x_4 \end{pmatrix} \tag{13.4.7}$$

另一方面

$$\begin{pmatrix} x_4' - x_1' \\ x_3' - \mathrm{i}x_2' \\ x_3' + \mathrm{i}x_2' \\ x_1' + x_4' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -\mathrm{i} & 1 & 0 \\ 0 & \mathrm{i} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \\ x_4' \end{pmatrix} = Bx \tag{13.4.8}$$

而矩阵 B 的逆为

$$B^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \mathrm{i} & -\mathrm{i} & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{13.4.9}$$

因而由(13.4.7)式得到

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \\ x_4' \end{pmatrix} = B^{-1} \begin{pmatrix} \alpha\alpha^* & \alpha\beta^* & \alpha^*\beta & \beta\beta^* \\ \alpha\gamma^* & \alpha\delta^* & \beta\gamma^* & \beta\delta^* \\ \alpha^*\gamma & \beta^*\gamma & \alpha^*\delta & \beta^*\delta \\ \gamma\gamma^* & \gamma\delta^* & \gamma^*\delta & \delta\delta^* \end{pmatrix} B \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \tag{13.4.10}$$

由此得到与 $A = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$ 相对应的 Lorentz 群的变换 $L_A(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$ 为

$$L_A(\alpha, \beta, \gamma, \delta) = B^{-1} \begin{pmatrix} \alpha\alpha^* & \alpha\beta^* & \alpha^*\beta & \beta\beta^* \\ \alpha\gamma^* & \alpha\delta^* & \beta\gamma^* & \beta\delta^* \\ \alpha^*\gamma & \beta^*\gamma & \alpha^*\delta & \beta^*\delta \\ \gamma\gamma^* & \gamma\delta^* & \gamma^*\delta & \delta\delta^* \end{pmatrix} B = (L_1, L_2, L_3, L_4) \tag{13.4.11}$$

其中

$$L_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\alpha\alpha^* - \gamma\gamma^* - \beta\beta^* + \delta\delta^*) \\ \mathrm{Im}(\alpha\gamma^* + \beta^*\delta) \\ \mathrm{Re}(-\alpha\gamma^* + \beta\delta^*) \\ \frac{1}{2}(-\alpha\alpha^* + \beta\beta^* - \gamma\gamma^* + \delta\delta^*) \end{pmatrix}, \quad L_2 = \begin{pmatrix} \mathrm{Im}(\alpha\beta^* + \gamma\delta^*) \\ \mathrm{Re}(\alpha\delta^* - \beta\gamma^*) \\ \mathrm{Im}(\alpha\delta^* + \beta^*\gamma) \\ \mathrm{Im}(\alpha\beta^* + \gamma\delta^*) \end{pmatrix}$$

$$L_3=\begin{pmatrix}\mathrm{Re}(-\alpha\beta^*+\gamma\delta^*)\\ \mathrm{Im}(\alpha^*\delta+\beta^*\gamma)\\ \mathrm{Re}(\alpha\delta^*+\beta^*\gamma)\\ \mathrm{Re}(\alpha\beta^*+\gamma\delta^*)\end{pmatrix},\quad L_4=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}(-\alpha\alpha^*-\beta\beta^*+\gamma\gamma^*+\delta\delta^*)\\ \mathrm{Im}(\alpha^*\gamma+\beta^*\delta)\\ \mathrm{Re}(\alpha^*\gamma+\delta\beta^*)\\ \frac{1}{2}(\alpha\alpha^*+\beta\beta^*+\gamma\gamma^*+\delta\delta^*)\end{pmatrix}$$

(13.4.9)式表示与 A 对应的$[L_A(\alpha,\beta,\gamma,\delta)]_{44}$为

$$[L_A(\alpha,\beta,\gamma,\delta)]_{44}=\frac{1}{2}(\alpha\alpha^*+\beta\beta^*+\delta\delta^*+\gamma\gamma^*)\geqslant 0 \tag{13.4.12}$$

而且

$$\det L_A(\alpha,\beta,\gamma,\delta)=\det B^{-1}\det L_{A'}(\alpha,\beta,\gamma,\delta)\det B=\det L_{A'}(\alpha,\beta,\gamma,\delta)$$

其中

$$\det L_{A'}(\alpha,\beta,\gamma,\delta)=\det\begin{pmatrix}\alpha\alpha^* & \alpha\beta^* & \alpha^*\beta & \beta\beta^*\\ \alpha\gamma^* & \alpha\delta^* & \beta\gamma^* & \beta\delta^*\\ \alpha^*\gamma & \beta^*\gamma & \alpha^*\delta & \beta^*\delta\\ \gamma\gamma^* & \gamma\delta^* & \gamma^*\delta & \delta\delta^*\end{pmatrix}$$

$$=\left[\det\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{pmatrix}\right]^2\left[\det\begin{pmatrix}\alpha^* & \beta^*\\ \gamma^* & \delta^*\end{pmatrix}\right]^2=1$$

因而

$$\det L_A(\alpha,\beta,\gamma,\delta)=1 \tag{13.4.13}$$

(13.4.12)式和(13.4.13)式说明与 $SL(2)$ 群元素 A 相对应的 Lorentz 群元素 $L_A(\alpha,\beta,\gamma,\delta)\in L_+^\uparrow$.

如果

$$\hat{x}'=A\hat{x}A^+\quad\Rightarrow\quad x'=L_A(\alpha,\beta,\gamma,\delta)x$$

则

$$\hat{x}''=A\hat{x}'A'^+=A'A\hat{x}A^+A'^+=(A'A)\hat{x}(A'A)^+\quad\Rightarrow\quad x''=L_{A'A}x$$

其中

$$A'A=\begin{pmatrix}\alpha' & \beta'\\ \gamma' & \delta'\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha'\alpha+\beta'\gamma & \alpha'\beta+\beta'\gamma\\ \alpha\gamma'+\gamma\delta' & \beta\gamma'+\delta\delta'\end{pmatrix}=A''(\alpha'',\beta'',\gamma'',\delta'')$$

因而 $SL(2)$ 群的元素与 $L_+^\uparrow$ 群的元素之间确实存在一种同态映射，即

$$SL(2)\Rightarrow L_+^\uparrow$$

$$A=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{pmatrix}\Rightarrow L_A(\alpha,\beta,\gamma,\delta)$$

$$A''=A'A=\begin{pmatrix}\alpha'' & \beta''\\ \gamma'' & \delta''\end{pmatrix}\Rightarrow L_{A'}(\alpha',\beta',\gamma',\delta')L_A(\alpha,\beta,\gamma,\delta)=L_{A''}(\alpha'',\beta'',\gamma'',\delta'')$$

但是这种映射不是一对一的，只是一种同态映射. 如

$$E=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\ \bar{E}=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\quad E,\ \bar{E}\in SL(2)$$

容易得到

$$L_E(1,0,0,1)=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=L_{\bar{E}}(-1,0,0,-1) \qquad (13.4.14)$$

群 $I=\{E,\ \bar{E}\}$ 构成 $SL(2)$ 与 $L_+^\uparrow$ 间映射同态核，因而商群

$$SL(2)/I\simeq L_+^\uparrow \qquad (13.4.15)$$

在(13.2.1)式中我们把 $L_+^\uparrow$ 的元素表示为

$$A(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2,b)=R_1(\alpha_1,\beta_1,0)\exp(b\mathscr{B}_3)R_2(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)$$

参数变化范围为 $b\geqslant 0$，$0\leqslant\alpha_1$，$\alpha_2\leqslant 2\pi$，$0\leqslant\beta_1$，$\beta_2\leqslant\pi$，$0\leqslant\gamma_2\leqslant 2\pi$.

$SL(2)$ 群的无穷小生成元 $\sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$ 与 $L_+^\uparrow$ 群的 $\mathscr{B}_3$ 相对应，而 σ_3 的指数映射为

$$\exp(b\sigma_3)=\begin{pmatrix}e^{\frac{b}{2}}&0\\0&e^{-\frac{b}{2}}\end{pmatrix}$$

因而与相对的 $SL(2)$ 群的元素为

$$U(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2,b)=U(\alpha_1,\beta_1,0)\exp(b\sigma_3)U(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)$$

在(3.1.10)式中已给出与转动 $R(\alpha,\beta,\gamma)$ 相对应的 $SL(2)$ 群的子群 $SU(2)$ 群中的元素为

$$U(\alpha,\beta,\gamma)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha+\gamma)/2}&-\sin\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\\\sin\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha+\gamma)/2}&\cos\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha+\gamma)/2}\end{pmatrix} \qquad (13.4.16)$$

因而 $SL(2)$ 群的元素可写为

$$U(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)=U(\alpha_1,\beta_1,0)\exp(b\sigma_3)U(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2) \qquad (13.4.17)$$

由(13.3.42)式和(13.2.1)式看到

$$\left.\begin{array}{l}U(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2,b)\\U(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2+2\pi,b)\end{array}\right\}\Rightarrow A(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2,b)$$

而 $U(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2+2\pi,b)=-U(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2,b)$，上式可表示为

$$\left.\begin{array}{l}U(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2,b)\\\bar{E}U(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2,b)\end{array}\right\}\Rightarrow A(\alpha_1,\beta_1,0,\alpha_2,\beta_2,\gamma_2,b)$$

这也证明了 $\{E,\ \bar{E}\}$ 为 $SL(2)$ 群与 $L_+^\uparrow$ 群的同态核.

这就证明了 $SL(2)$ 群是 $L_+^\uparrow$ 的二重覆盖群，这一点与 $SU(2)$ 群是 $SO(3)$ 群的覆盖群是完全相似的. 因而可用讨论 $SL(2)$ 群不可约表示的方法讨论固有 Lorentz 群 $L_+^\uparrow$ 的不可约表示.

结束语——物质世界的对称性

群论是研究对称性的一门数学分枝，本书前面十三章关于群论的基本理论为研究物质世界的对称性提供了数学工具. 在本书结束时，简单概要地讨论一下物质世界的对称性和由这些对称性导致的物理规律.

1982 年 1 月 4 日，国际著名物理学家杨振宁教授在香港大学所作的《对称与 20 世纪物理学》的演讲中曾说道："发展到近代，我们已经知道这个观念(指对称性)是晶体学、分子学、原子学、原子核物理、化学、粒子物理学等现代科学的中心观念. 近年来对称性变成了决定物质间相互作用的中心思想. "杨教授在中国科学院的一次学术报告中也曾说过"对称性的研究是 20 世纪物理学发展的主旋律". 可见物质世界的对称性在科学上有多么重要.

物质世界的对称性，大体上可归纳为如下的四类，即时空对称性、置换对称性、动力学对称性、内禀对称性和规范对称性，每一个对称性都导致了一种物理规律.

一、四维时间-空间的对称性及相关物理规律

现实空间为三维空间，时间为一维空间，把时间和空间一起讨论就构成了时-空四维空间，即 Minkowski 空间. 任何一个物理现象均为四维空间中的一个"点". Minkowski 空间中全部保持两点距离不变的非齐次线性变换构成 Poicaré 群 $P(4)$，可用 Poicare 群来研究四维空间的对称性. Poicare 群是四维时空中最大的线性变换群.

Poicare 群有丰富的子群，它们都描述了四维时空的一定的对称性，并导致了一定的物理规律. 下面分别讨论它们.

(一) 四维时空中时间的对称性

如果只讨论四维时空中的时间(这是一个一维空间)，可得到两个有关时间的对称性，它们都是 Poicare 群的子群.

1. 时间平移对称性与时间平移群

时间平移可定义为 $\hat{T}_e$，它作用于时间 t 得到

$$\hat{T}_e t = t'' = t + t'$$

全部时间平移构成一个一维的平移群，如果物理体系具有时间平移对称性，则物理体系具有能量守性的性质，亦即物理体系能量守性来源于时间平移对称性.

2. 时间反演对称性与时间反演群

把时间 t 变为 $-t$，称为时间反演，描述时间反演可用算子 $\hat{K}$，$\hat{K}$ 作用于态函数 Ψ 为 $\hat{K}\Psi = \Psi^*$，时间反演算子 $\hat{K}$ 与单位元 E 构成时间反演群 $\{E, \hat{K}\}$. 如果物理体系具有时间

反演对称性，导致 Kramers 简并，即:奇数 Fermi 子体系若具有时间反演对称性时，体系至少是二度简并的.

(二) 空间对称性

如果只讨论四维时空中的三维空间，此时三维空间中的保持距离不变的非齐次线性变换构成三维空间的 Euclid 群 $E(3)$，它也是 $P(4)$ 的子群.

1. 平移对称性

Euclid 群的一个平移子群为空间平移群 $\hat{T}_a$，具有平移对称性的物理体系具有动量守恒的性质.

2. $O(3)$ 与 $SO(3)$ 群

Euclid 群中由齐次线性变构成的子群为 $O(3)$ 群，它的单模子群为 $SO(3)$ 群，或称为三维旋转群. 具有旋转对称性的物理体系轨道角动量守恒.

3. 空间群与晶体对称性

如果限定 Eucilid 群 $E(3)$ 中的平移为有限值，即 $\|\boldsymbol{r}\|>0$. 就得到了空间群，第五章已证明了全部空间群只有 230 个，它们决定了晶体空间结构.

4. 点群与分子结构

如果在 $O(3)$ 中，限定转动角度为有限值，则得到了点群. 点群决定了分子的空间结构和对称性.

(三) 相对论的时空对称性

如果在 Poicare 群 $P(4)$ 中只保留齐次线性变换，则得到 Lorentz 群. 这种时空之间的关系是相对论的理论基础.

注意上面所说的宇称是标记现实空间中左右对称性的物理量，比如具有空间反射对称性的电子体系均存在宇称守恒. 这个宇称与基本粒子的内禀宇称在物理意义上是完全不同的.

二、全同粒子置换对称性及其物理规律

物质世界中存在大量基本粒子，如电子、原子、中子、介子等等. 每一类基本粒子中所有的单个粒子都是完全相同而不可区分的，因而称为全同粒子. 由一类全同粒子构成的物理体系显然任意置换粒子体系是不发生变化的，从对称角度说就是全同粒子具有置换对称性，描述这种对称性的群就是 n 个对象的置换群 S_n，n 为体系中的粒子数. 由于基本粒子具有置换对称性，而把基本粒子分为 Fermi 子和 Bose 子. 由于 Fermi 子任意置换两个粒子具有反对称性，因而 Fermi 子遵守 Pauli 不相容原理，而 Bose 子具有置换对称性，因而不受 Pauli 原理的限制，而且 Fermi 子体系遵从 Fermi-Dirac 统计，Bose 子遵从 Bose-Einstein 统计.

三、动力学对称性与动力学群

前边讨论的除全同粒子置换对称性之外，完全是物理体系在时间空间变换下所具有的对称性. 除了这些对称性之外，物理体系内部的相互作用还存在其它对称性，这些对称性是由体系的动力学性质造成的，称为动力学对称性，相应的群称为体系的动力学群(dynamical groups). 在基本粒子中，由于基本粒子存在的空间非常之小，通常的现实空间的对称性已退居为次要的地位，因而主要的是动力学对称性. 下面仅对动力学对称性的一个例子做些简单说明.

氢原子的动力学对称性和动力学群

氢原子是由一个电子和一个质子构成的最简单的量子体系，质子和电子之间考虑 Coulonb 作用，因而体系的 Hanilton 算子为

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \tag{1}$$

在忽略自旋的情况下本征函数为

$$\Psi_{nlm_l}(\boldsymbol{r}) = R_{nl}(r)\Psi_{lm_l}(\theta, \varphi) \tag{2}$$

能量本征值为

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \tag{3}$$

其中 n 称为主量子数，l 称为角量子数，m_l 称为磁量子数. 对于一定的 n，l 可取 0，1，2，…，$n-1$，对一定的 l，m_l 取 l，$l-1$，$l-2$，…，$-l$，因而退化度为 $2n^2$（空间退化度为 $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$，每个电子自旋退化度为 2）.

(1)式给出的 Hamiltion 算子具有 $SO(3)$ 群的对称性，因而本征函数(2)中出现角动量量子数 l 及其分量 m_l. 但是 $SO(3)$ 对称性应当要求退化度为 $2(2l+1)$ 而不是 $2n^2 = 2\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)$，不同 $l(l=0, 1, 2\cdots n)$ 的态具有相同能量本征值并不是由 $SO(3)$ 对称性得到的，这种偶然退化出现的原因是什么呢？回答这个问题要研究(1)式给出的 Hamiltion 算子还有什么其它对称性.

在用经典力学研究天体运动的 Kepler 问题中，出现一个守恒的向量——Runge-Lenz 向量 $\boldsymbol{A}$，它为

$$A = \frac{\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{L}}{m} - k\frac{\boldsymbol{r}}{r} \tag{4}$$

其中 $\boldsymbol{P}$ 为动量，$\boldsymbol{L}$ 为角动量，$V(\boldsymbol{r}) = -\dfrac{k}{r}$ 为行星绕恒星旋转的势能，m 为行星质量. 这个问题与氢原子问题在动力学上是一样的. 因而把经典的 Runge-Lenz 向量量子化可得到量子体系的 Runge-Lenz 向量所对应的厄米算符，即

$$\hat{A} = \frac{1}{2m}(\hat{P}\times\hat{L} - \hat{L}\times\hat{P}) - \frac{e\boldsymbol{r}}{r}$$

$$\hat{A}^2=\frac{2\hat{H}}{m}(\hat{L}^2+h^2)+e^2 \tag{5}$$

可以证明量子 Runge-Lenz 向量算符与 Hamilton$\hat{H}$ 交换，即

$$[\hat{A},\ \hat{H}]=0 \tag{6}$$

而且

$$\hat{L}A=A\hat{L}=0 \tag{7}$$

经过计算可证明角动量算符 $\hat{L}$ 与 Runge-Lenz 算符 $\hat{A}$ 之间存在如下交换关系，即

$$[L_i,\ L_j]=\mathrm{i}E_{ijk}L_k,\quad [L_i,\ A_j]=\mathrm{i}E_{ijk}A_k$$
$$[A_i,\ A_j]=-2\mathrm{i}\hat{H}E_{ijk}L_k \tag{8}$$

在交换关系(8)的第三式中出现 Hamilton 算符 $\hat{H}$，为了避免这一问题，重新定义算符 $\hat{M}$，即令

$$\hat{M}=\frac{1}{\sqrt{-2H}}\hat{A} \tag{9}$$

从而交换关系(8)变为

$$\begin{cases}[L_i,\ L_j]=\mathrm{i}E_{ijk}L_k,\quad [L_i,\ M_j]=\mathrm{i}E_{ijk}M_k,\quad [M_i,\ M_j]=\mathrm{i}E_{ijk}L_k,\quad \text{当}\ E<0\ \text{时}\\ [L_i,\ L_j]=\mathrm{i}E_{ijk}L_k,\quad [L_i,\ M_j]=\mathrm{i}E_{ijk}M_k,\quad [M_i,\ M_j]=-\mathrm{i}E_{ijk}L_k,\quad \text{当}\ E>0\ \text{时}\end{cases} \tag{10}$$

为了更清楚地看清这一问题，定义算符 $\hat{J}$ 和 $\hat{J}'$，令

$$\hat{J}=\frac{1}{2}[\hat{L}+\hat{M}],\qquad \hat{J}'=\frac{1}{2}[\hat{L}-\hat{M}] \tag{11}$$

此时(10)式给出的交换关系变为

$$[J_i,\ J_j]=iE_{ijk}J_k,\quad [J_i',\ J_j']=iE_{ijk}J_k',\quad [J_i,\ J_j']=0 \tag{12}$$

由第十一章讨论的 $SU(2)$ 群理论，可看出 $\hat{J}$ 为一个 $SU(2)$ 群的无穷小生成元，$\hat{J}'$为另一个 $SU(2)$ 群的生成元，由它们生成直积群 $SU(2)\otimes SU(2)$. 由第九章讨论的理论可得到 $\hat{J}$ 和 $\hat{J}'$的 6 个算符为 $SO(4)$ 群的无穷小生成元，$SO(4)$ 群与 $SU(2)\otimes SU(2)$ 群局部同构.

由于

$$[\hat{H},\ \hat{L}]=0,\quad [\hat{H},\ \hat{A}]=0$$

因而

$$[\hat{H},\ \hat{J}_i]=[\hat{H},\ \hat{J}_i']=0,\quad i=x,\ y,\ z \tag{13}$$

这表明氢原子 Hamilton$\hat{H}$ 具有$SO(4)$群的对称性，称这种对称性为动力学对称性，称 $SO(4)$ 群为氢原子的动力学群.

第十一章已指出 $SU(2)$ 群的 Casimir 算子为 $\hat{J}^2$，它的本征值为 $j(j+1)$，$SO(4)$ 群的两个 Casimir 算子为

$$\hat{C}_1=\hat{J}^2+\hat{J}'^2=\frac{1}{2}(\hat{L}^2+\hat{M}^2),\ \hat{C}_2=\hat{L}-\hat{M}=\hat{J}^2-\hat{J}'^2 \tag{14}$$

因而 $\hat{C}_1$ 的本征值为 $j(j+1)+j'(j'+1)$. 由于(6)中第二个 Casimir 算子 $\hat{C}_2=\hat{L}-\hat{M}=0$, 因而要求 $j=j'$, 因此得到 $SO(4)$ 群 Casimir 算子 $\hat{C}_1$ 的本征值 C_1 为

$$C_1=j(j+1)+j'(j'+1)=2j(j+1) \quad j=0,\ \frac{1}{2},\ 1\cdots \tag{15}$$

利用(5)式(9)式和(10)式可得到

$$\hat{C}_1=\hat{J}^2+\hat{J}'^2=\frac{1}{2}(\hat{L}^2-\frac{1}{2E}\hat{A}^2)=-\frac{1}{4E}-\frac{1}{2} \tag{16}$$

在这里以 $\hat{H}$ 的本征值 E 代替了 $\hat{H}$, 因而得到

$$2j(j+1)=-\frac{1}{4E}-\frac{1}{2}$$

由此得到

$$E_j=\frac{1}{2(2j+1)^2},\quad j=0,\ \frac{1}{2},\ 1 \tag{16}$$

由于 $J=0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \cdots$, 因而 $(2j+1)=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$, 令 $2j+1=n$, 于是

$$E_n=-\frac{1}{2n^2},\quad n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots \tag{17}$$

$n=(2j+1)$, j 为 $SO(4)$ 群不可约表示标记 $[i,j]=[j,i]$, 它的退化度为 $(2j+1)(2j+1)=(2j+1)^2=n^2$. 也就是说氢原子具有动力学群 $SO(4)$ 的对称性, 因而 $SO(4)$ 群不可约表示 $[j,j']$ 的基矢是氢原子的本征态, 由于 $\hat{L}\hat{M}=0$, 限定了只有 $j'=j$ 的不可约表示 $[j,j]$ 才是真正的本征态. 这个不可约表示的维数是 $n^2=(2j+1)^2$, 因而是 n^2 重退化的. $SO(4)$ 群的不可约表示 $[j,j]$ 分解到子群 $SO(3)$ 的不可约表示的分解规则为

$$[j,j]=(0)\oplus(1)\oplus(2)\oplus\cdots\oplus(2j)$$

这恰是在一定量子数 n 确定的能级中包括角量子数 $l=0,\ 1,\ 2\cdots n-1$ 的退化态的对称性根源.

在 Wyboure 所著"Classical Groups for Physicists"一书中称 $SO(4)$ 为氢原子的"退化群", 而称 $SO(4,2)$ 为动力学群. $SO(4)$ 是 $SO(4,2)$ 的子群. 利用群论的方法 $SO(4,2)$ 群某个不可约表示的一个基矢利用升降阶梯算符可得到 $SO(4,2)$ 群这个不可约表示所包括的子群 $SO(4)$ 各种不可约表示的基(如本书第十二章讨论的, 由 $SU(2)$ 群一个特定 J 的基矢利用升降算符 J_+, J_- 可得到不可约表示 J 的全部基矢). 在这个意义上 $S(4,2)$ 群反映氢原子更深刻的对称性. 但是从动力学对称性来看, 称 $SO(4)$ 群为动力学群是完全可以的, 其它一些讨论动力学对称性的书也多数称 $SO(4)$ 群为动力学群.

一般来讲, 一个物理体系如果具有某种空间变换的对称性, 它的能级退化度与这个群的不可约表示的维数相同, 退化来源于这种对称性. 如果体系的能级退化度大于对称群的不可约表示的维数, 一般称为偶然退化. 如果偶然退化是有明显规律的, 就预示着体系除了具有一定的空间变换对称性外, 还存在着更大的对称性, 也就是说存在以空间对称群为子群的动力学群, 因而这种偶然退化并不偶然, 而是来源于动力学对称性.

对原子分子体系的动力学对称性有兴趣的读者可参阅 Wulfman 的论文"Dynamical

Groups in Atomic and Molecular Physics".

本节的目的不在于具体讨论一定物理体系的动力学对称性和动力学群，而在于说明一定物理体系除了它所具有的时-空对称性外，体系内部相互作用，具体表现为 Hamilton 算子的形式，还可能具有更高的对称性. 描写这种对称性的群已是抽象空间中的群了，从而说明本书第十二章中所讨论的抽象空间中的各种群，特别是一些酉群对描述物理体系是很有用的.

四、基本粒子的内禀空间与内禀空间的对称群

基本粒子(如电子、质子、中子、介子、光子等等)体系，在它们之间的相互作用下不仅具有在时间空间中的运动变化规律，还具有由这些基本粒子固有属性决定的体系的固有性质的变化规律，基本粒子的这些固有属性称为内禀属性(intrinsic property). 在现代物理学的研究中，这些内禀的变化规律都可抽象为表示内禀属性的物理量，在一定内禀空间中的运动变化规律(注意内禀空间与现实空间是完全不同的，只是研究基本粒子而引入的抽象的数学空间). 这些内禀空间在一定相互作用下，具有一定的对称性，称为内禀对称性(intrinsic symmetry)，相应的群称为内禀群(intrinsic groip). 因而不仅现实时空中的变换群可用来研究物理体系的时空运动性质，对于基本粒子体系也可以用内禀空间的对称性来研究内禀性质. 迄今为止，描述基本粒子内禀性质的内禀空间都是各种维数的酉空间，内禀群为各种维数的 $SU(N)$ 群. 因而第十二章所讨论的 $SU(N)$ 群大量地应用于基本粒子物理学之中.

详细讨论这些问题已远远超出了本书的范围，下面只对内禀性质和内禀对称性做一些简单的常识性的说明，目的是使不了解基本粒子物理的读者看到各种抽象 $SU(N)$ 群在研究基本粒子物理学中的应用.

(一) 电子自旋与自旋空间的 $SU(2)$ 群

作为电子的内禀属性，电子有自旋，但是这种自旋与天体运动中除公转之外的自身转动，从而具有一定自旋角动量，是有本质区别的. 电子自旋绝不是描述它在现实空间中的转动，而是这种内禀性质可用一个完全抽象的二维酉空间中的旋量来描述. 描述自旋对称群是二维酉空间中的 $SU(2)$ 群. 在非相对论性的原子理论中，可认为电子在三维现实空间和描述自旋的二维酉空间中运动，当不考虑自旋与轨道间的相互作用时，这两个空间是完全独立的. 原子体系具有 $SO(3)\otimes SU(2)$ 的对称性. 这就是原子理论中的 S-L 图像，能级退化度为 $(2S+1)(2L+1)$. 当考虑自旋与轨道的相互作用时，这两个空间发生了相互作用，此时对称性变为 $SO(3)\otimes SU(2)\supset SU(2)$ (空间的 $SO(3)$ 局部同构于 $SU(2)$)，因而原子体系的对称群为 $SU(2)$，这个 $SU(2)$ 群的无穷小生成元为 $L+S=J$. 在这种图像下，能级由 S，L，J 和 M_J 标记，退化度为 $2J+1$. $J=|L-S|$，$|L-S|+1$，$\cdots$，$L+S$.

（二）同位旋与同位旋空间的 $SU(2)$ 群

原子核是由于若干质子和中子在核力作用下形成的稳定粒子，原子和中子具有相同的自旋($J=\frac{1}{2}$)，而质量也十分相近，它们的差别只是电荷不同，质子带一个单位的正电荷，中子电荷为零. 因而可把它们看成是一种粒子-核子，而质子和中子为核子的不同状态. 可用具有 $SU(2)$ 对称性的二维酉空间描述它们，这种内禀空间称为同位旋空间，这种内禀性质称同位旋. 在同位旋空间中可把质子(p)和中子(n)表示为两个状态，即

$$|p\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}, \qquad |n\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

这两个状态是 $SU(2)$ 群不可约表示$\left[\frac{1}{2}\right]$的基矢，因而核子的同位旋 I 为$\frac{1}{2}$.

在强相互作用中还发现寿命仅有 10^{-8}s 的 π 介子，这种介子有三种带电类型，即 π^+，π^0，π^-，它们分别带一个正电荷、没有电荷和带一个负电荷，而其它性质基本相同. 因而也可把它们视为同位旋空间中不可约表示为 1 的三个状态，即 π 介子的同位旋为 1，它包括三个分量，即 $I_z=1$，0，-1. 其它一些介子也可按同位旋分类.

实验证明在强相互作用下，同位旋空间是有 $SU(2)$ 群的对称性的，因而 $SU(2)$ 群在基本粒子强相互作用研究中是有重要作用的.

在研究高能粒子中，物理学家还在内禀空间中引入了 $SU(3)$ 群、$SU(4)$ 群和 $SU(6)$ 群. 这都表明了抽象的 $SU(N)$ 群在物理学中有着重要应用.

在研究基本粒子内禀性质时，除了在内禀空间中引入各种 $SU(N)$ 群外，还有一个分立的二阶群，这就是描述内禀空间镜像反射性质的宇称(parity)，为了与电子体系在现实空间中的宇称相互区别，严格说应当称为内禀宇称(intrinsic parity). 实验已经证明，在强相互作用下，内禀空间具有镜像反射对称性，因而宇称守恒，而在弱相互作用下内禀空间不具有这种对称性，因而在弱相互作用下宇称不守恒.

（三）规范群

描述基本粒子内禀空间对称性的某种对称群 $SU(N)$，第九章已说明它有 $m=N^2-1$ 个连续参数 α^i，$i=1, 2, \cdots, m$. 因而有 m 个无穷小算子，它们构成相应 Lie 代数$su(N)$，则 $SU(N)$ 群元素的矩阵表示为

$$g(\alpha^i) = e^{i\alpha^i J_i}$$

若 α^i 是遵从 Lorentz 变换的时空四维空间点 x 的函数，则为 $\alpha^i(x)$，此时 $SU(N)$ 就称为定域规范群(local gauge group)，这种定义在与 Lorentz 时空正交的内禀空间中的规范群，把基本粒子内禀属性与现实的时空联系起来. 基本粒子在具有相对论变换性质的时空与具有特定 $SU(N)$ 对称性的内禀空间中运动，这一点与原子体系中电子在具有 $SO(3)\times SU(2)$ 对称性的现时空间和内禀自旋的二酉空间中运动是完全相似的. 规范对称性在现代基本粒子物理中有广泛和重要的应用.

[General Information]
书名=理论化学中的群论方法
作者=唐敖庆著
页数=648
SS号=11990951
DX号=
出版日期=2003.9
出版社=吉林大学出版社